



TITLE:

スピングラス模型における1段階レプリカ対称性の破れを伴う解の熱力学的構成(修士論文(2008年度))

AUTHOR(S):

中島, 哲也

CITATION:

中島, 哲也. スピングラス模型における1段階レプリカ対称性の破れを伴う解の熱力学的構成(修士論文(2008年度)). 物性研究 2009, 92(3): 300-342

ISSUE DATE:

2009-06-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/169136>

RIGHT:

スピングラス模型における 1段階レプリカ対称性の破れを伴う解の熱力学的構成

東京大学大学院 総合文化研究科 福島研究室 中島 哲也*

目次

1 はじめに	300
2 スピングラス模型の相転移現象	301
3 Parisi 理論の概要	307
4 レプリカ法の正当化に関する数学的困難	314
5 有限レプリカ数でのレプリカ対称性の破れ	316
6 疎結合スピングラス模型の解析	325
7 まとめ	333
A 疎結合スピングラス模型の解析の詳細	334

1 はじめに

私たちは水が氷になることを、水が固まる、と呼ぶ。熱して溶けた飴細工もやはり、冷えると固まる。ならば冷やさなければ固まらないか、と言えば必ずしもそうではなく、卵はゆでると固まる。また難しい試験問題を前にして「固まった」経験のある方も、私を含めて少なくないだろう。

言語学の世界では、ある単語の根元的な意味を押さえるためにこのようにして具体例を列挙する。今の場合、この言葉遊びからわかることは、「固まる」とは「外部からの(主に力学的な)操作に対する応答が極端に鈍る」ことである、と私たちは了解しているということだ。言語学であれば、それが一つの単語、ひいては私達日本人の持つ感性への理解を助けさえすれば十分であろうが、本修士論文はそれを目的とするものではない。固まることを物理的に理解したい。

物理的に理解したいとは、言い替えれば、現象を普遍的に理解したい、ということだと思う。例えば飴が固まることとPCが固まることを同じ枠組で議論できたらどんなに驚くべきことだろう。そしてその驚くべき記述能を持った枠組とはいかなるものだろうか。想像は尽きない。しかしそういった普遍的な枠組を夢見る前に、連想による直観から並べられただけの現象群に、問題として適切な形(モデル)を与える必要がある。例えば、タンパク質の熱変性や各問題の難易度といったことをそのまま考えていては普遍的な記述にはたどり着けないだろう。

*E-mail: tetsuya@huku.c.u-tokyo.ac.jp

そういった試行錯誤の末、卵が固まる、というタンパク質の熱変性の問題からひとまず詳細を捨象することで、一般的なタンパク質の折りたたみ問題として扱ったり、人間がからむと難しいので一つランクを落として、どういう問題を出されるとコンピュータは困ってしまうのか考えたりしてきた。そして特筆すべきは、こういった問題はみな統計力学による解析が行われてきたという点である。

飴が砂糖の結晶にならないときはまさにガラス化が起こっているし、タンパク質のネイティブ構造を自由エネルギー地形になぞらえて理解したり、問題を解く時間がべらぼうにかかるようになることが相転移として理解できるのを知った。そしてこれら個々の研究の、理論的源流におそらくあると思われる研究、それこそが本修士論文の主題であるスピングラスである。スピングラスは、履歴やエイジングなど、ガラス系に特有の性質を持つ磁性体である。従来の統計力学での強磁性体模型などとの類似性から、他のガラス系に比べて系統的な研究が多くなされ、その結果、以下の章でも述べるような様々な性質が明らかになっている。

さて、スピングラスを研究する目的のひとつとして、その物性の理解そのものがあることは間違いない。Cannella-Mydosh による発見 [1] 以来 30 年以上が経過したにもかかわらず、3 次元スピングラスの定性的理解についてでさえ、複数の見解が見られ落ち着いていない。しかしその一方で、特に今日的な目的意識として、これら多くの固まる現象の雛型としてのスピングラス、という見方も軽視できないだろう。ここで述べたような様々な系を統一的に見る一つの虫メガネとしてのスピングラス理論が強力であること¹ は、ここ 10 年来のガラス系の理解の進展や情報統計力学などの分野における手法の有効性が如実に物語っているだろう。

とは言え、スピングラス理論との類似性のみをテコにして他の分野に乗り込んでいくのは、個々の分野から見れば新しい観点を提供できるかもしれないが、「固まることの理解」というスピングラス理論が提供すべきより大きな目標を見失いかねない。だからこそ筆者は、物性論としてのスピングラス理論以上のものを求める一方で、逆にどこか一つの分野におもねることのない普遍的な理解を求めて研究している。その目標への一里塚が、本修士論文である。

そこで本修士論文では、スピングラスに関して筆者がこのような観点から行った現在までの研究をまとめたい。特に平均場的なスピングラス模型に対する平衡状態の解析を行う。スピングラス模型の平衡状態を特徴づける性質としてレプリカ対称性の破れが挙げられるが、その特徴づけに対する貢献が、本研究を通じて多少なりともできたのではないかと考えている。

本論文の構成は以下のようなものである。まず第2章でスピングラス模型を導入し、その解析を行う。それを通じて、スピングラス理論において見出された現象を紹介したい。第3章では、Sherrington-Kirkpatrick 模型の厳密解でもある Parisi 解とその特徴であるレプリカ対称性の破れについて言及したい。第4章では、本修士論文においてもっとも強力な道具立てであるレプリカ法の数学的な性質について言及したい。第5章が、本修士論文の中心である。ここでは、筆者らが初めて提案した「単調性の破れによるレプリカ対称性の破れ」というシナリオと、それが実際に起こっていることを紹介したい。そこでは、非常に普遍的な構造である熱力学が主役となり、レプリカ対称性の破れが導かれることを示す。第6章では第5章で明らかになった構造を生かし、従来法では決定打のなかった疎結合スピングラス模型に対するレプリカ対称性の破れの導入を行い、数値計算と比較する。

2 スピングラス模型の相転移現象

スピングラス (spin glass, SG) に関する理論的研究は、Edwards-Anderson(EA) による平均場理論の研究に端を発する。この章では、まず歴史に倣い、EA 模型における平均場理論の導入を行う。そして

¹ 「固まるとは力学的な性質なのだからスピングラス理論のうち平衡に係わる部分は必要ない」と思われるかもしれない。しかし、平衡の情報が力学に制限を与えることは往々にしてあるし、「固まるまで」よりも「固まった後」のほうが大事な場合もある。固まった後についての情報を力学から引き出すことは、もちろん原理的には可能だろうが、現実的には非常に困難である。

Bethe-Peierls(BP) 近似などの素朴な解析を進めることで、分子場近似を改良する。この改良によって、第 6 章で行う疎結合 SG 模型の解を結果的に先取りすることになる。

2.1 Edwards-Anderson 模型

Edwards-Anderson による SG の理論 [2] で彼らは、Hamiltonian

$$H_{\text{EA}} = - \sum_{(ij)} J_{ij} S_i S_j \quad (2.1)$$

で記述される系の平均場解析を行った。ここに i, j は d 次元の正方格子点であり、 (ij) は d 次元格子上的のボンドにわたる和である。サイト数は N とし、スピンは解析の都合上 Ising スピン $S_i = \pm 1$ とする。また、 J_{ij} は SG における交換相互作用を表す項である。CuMn などの実際の SG 物質ではスピンを持つ Mn が Cu マトリックス中に散在しているため、スピン間の距離は各サンプルごとに異なる。Mn 上のスピン間には RKKY 相互作用が存在するため、距離の微妙な違いが、相互作用の符号の違いとして表れる。よって Mn の比率を一定としても、サンプルによって相互作用は様々なものを取りうるため、この事実をあらわに扱うことが困難であることは想像に難くない。

そこでスピンの位置に関するランダムネスを扱うことを避け、直接 J_{ij} に確率分布を与えることで、一つのサンプルの実現を J_{ij} の実現と同一視する。このことによって、 J_{ij} という正負を様々に取る実数の組で相互作用が表される。本章では $J_{ij} \sim N(0, 1)$ を仮定し、エネルギーの単位をボンドに取る。“ $\sim N(\mu, \sigma^2)$ ” は、平均 μ 、分散 σ^2 のガウス分布に従うことを意味する。

本章では、この模型を、彼らの解析方法とは異なる方法で解析する。Hamiltonian がこの形で与えられるということは、 $\mathbf{S} = \{S_i\}_{i=1}^N$ として、逆温度 β でのスピン配位の実現確率が

$$P(\mathbf{S}) = \frac{\exp(-\beta H_{\text{EA}})}{Z}, \quad (2.2)$$

$$Z = \text{Tr} \exp(-\beta H_{\text{EA}}) \quad (2.3)$$

で与えられるということであるから、この $P(\mathbf{S})$ を近似的に求める手法として、Weiss 近似と BP 近似を導入し、SG の物理的描像を議論したい。

2.2 Weiss 近似

Weiss 近似とは、ここでは

$$P(\mathbf{S}) \approx \prod_{i=1}^N p_i^{(W)}(S_i) \quad (2.4)$$

と書いてしまう近似である。これは物理的には、 S_i と S_j の間に相関はない、とする近似なので非常に粗いものであるが、そのおかげである程度までは計算できる。

まず、

$$p_i^{(W)}(S) = \frac{1 + m_i S}{2} \quad (2.5)$$

とおく。このとき、 $\sum_S p_i^{(W)}(S) = 1$ 、 $\sum_S S p_i^{(W)}(S) = m_i$ が成立する。一方、

$$P(\mathbf{S}) = \frac{1}{Z} \exp \left(\beta \left(\sum_{j(i)} J_{ij} S_j \right) S_i \right) \times (S_i \text{ を含まない因子}) \quad (2.6)$$

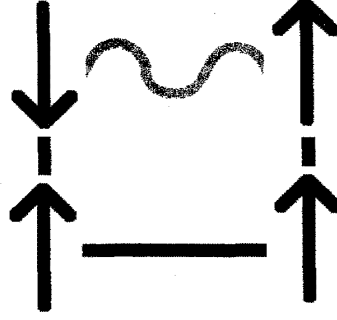


図 1: フラストレーションのある構造の例. 直線が $J > 0$ を, 波線が $J < 0$ を表す. この格子にスピンをどう入れようとも, 全てのボンドのエネルギーを同時に下げることができない.

と書ける. ここに $j(i)$ は i の近傍にわたる和を表す. (2.4) 式の仮定から, スピン間に相関はないとしていいので,

$$m_k = \frac{1}{Z} \text{Tr} S_k \exp \left(\beta \left(\sum_{j(k)} J_{kj} S_j \right) S_k \right) \times (S_k \text{ を含まない因子}) \quad (2.7)$$

$$\approx \frac{1}{Z_m} \sum_{S_k = \pm 1} S_k \exp \left(\beta \left(\sum_{j(k)} J_{kj} m_j \right) S_k \right) \quad (2.8)$$

$$= \tanh \left(\beta \sum_{j(k)} J_{kj} m_j \right) \quad (2.9)$$

と書ける. ここに

$$Z_m = \sum_{S_k = \pm 1} \exp \left(\beta \left(\sum_{j(k)} J_{kj} m_j \right) S_k \right) \quad (2.10)$$

である. このように, もっとも素朴な Weiss 理論 [3] と同様の結果を得る.

EA 模型の場合, この方程式を解析的に解くことはできないが, 3.1 節で導入する Sherrington-Kirkpatrick (SK) 模型においては (2.9) 式を常磁性 ($m_i = 0$) 側から摂動的に解くことで SG 転移温度 T_c を決めることができる. ただし SK 模型においては, $J_{ij} \sim N(0, \frac{1}{N})$ に従うとする. 秩序変数が常磁性相から連続的に立ち上がることを仮定して (2.9) 式を m で展開したとき, 磁化ベクトル \mathbf{m} は

$$\mathbf{m} \approx \beta J \mathbf{m} \quad (2.11)$$

という線型方程式に従うので, この行列 $J = (J_{ij})$ の最大固有値が転移温度 T_c になる. ランダム行列理論によれば, 各成分が $\sim N(0, \frac{1}{N})$ である対称行列の最大固有値は 2 であることが知られているので, ここから $T_c = 2$ が結論される. SK 模型は全結合型の模型であるので, 平均場方程式の解は定量的に正しい, と直感的には思われるが, 実は正しい評価では $T_c = 1$ が結論される. すなわち, 全結合模型を Weiss 近似で解いても, 定量的には正しくない結果が導かれてしまったことになる. これは, SG 模型の本質的特徴であるフラストレーションとランダムネスが関与している.

図 1 はフラストレーションのある格子構造の例である. 直線を $J > 0$, 波線を $J < 0$ とすると, どのようにスピンを入れても全てのボンドのエネルギーを下げることはできない. これは強磁性体模型にはなかった特徴である. 一般に低温では, できるだけエネルギーを下げるようにスピンは配置する. 強磁性体模型であれば全てのスピンは上や下にそろえばよいので, 各スピンとその他のスピンの競合はない.

よって Weiss 近似でも定性的な記述はできていた。しかしフラストレーションの中では、どちらを向こうともエネルギーを下げることでできないスピンの存在する。このようなスピンにとっては、「回りに合わせて自分が向く向きを決める」という効果ではエネルギー損得上の勝負がつかず、より高次の効果が効く可能性が高い。例えば、「自分が上を向くと隣がそれに揃ってくれるおかげで、上を向きやすくなる」という効果は、フラストレーションやランダムネスに影響されない。実際 SK 模型においては、高温展開ではより高次の項が、 N について $O(1)$ の量として表れることが示される [4]。このように、Weiss 近似では取り込まれないが、それでも SG 模型にとって重要な「自分の影響が自分に返ってくる」ような項を **Onsager の反跳項**と呼ぶ。以下では方法 [4] にはよらず、より素朴に近似の精度を上げることで結果的に同じ方程式にたどり着くことを見る。

2.3 Bethe-Peierls 近似

一体近似である Weiss 近似ではうまくなかったので、次は二体近似 (BP 近似) を試みる。 $C = 2d$ とし、

$$P(\mathbf{S}) \approx \frac{\prod_{(ij)} p_{ij}^{(BP)}(S_i, S_j)}{\prod_{i=1}^N p_i^{(BP)}(S_i)^{C-1}} \quad (2.12)$$

と近似する。分母は、2 体分布の張り合わせによって、一サイトあたり C 重に数えてしまっている分を割っている。ただし、BP 二体分布の可約性

$$\sum_T p_{ij}^{(BP)}(S, T) = p_i^{(BP)}(S) \quad (2.13)$$

を仮定する。まず、各分布を

$$p_{ij}^{(BP)}(S_i, S_j) = \frac{1}{Z_{ij}^{(BP)}} \exp(\beta(K_{ij}S_iS_j + h_i^{(j)}S_i + h_j^{(i)}S_j)) \quad (2.14)$$

$$Z_{ij}^{(BP)} = \text{Tr} \exp(\beta(K_{ij}S_iS_j + h_i^{(j)}S_i + h_j^{(i)}S_j)) \quad (2.15)$$

$$p_i^{(BP)}(S) = \frac{1}{Z_i^{(BP)}} \exp(\beta H_i S) \quad (2.16)$$

$$Z_i^{(BP)} = \text{Tr} \exp(\beta H_i S) \quad (2.17)$$

と書く。 H_i を局所場 (local field), $h_i^{(j)}$ を cavity 場 (cavity field) と呼ぶ²。cavity 場の上つき添字は、 $h_i^{(j)} \neq h_i^{(k)}$ であるため不可欠であるが、文脈から明らかな場合に限り、以下の計算では省略することもある。このとき、BP 二体分布は

$$\sum_T p_{ij}^{(BP)}(S, T) = \frac{2e^{\beta h_i S}}{Z_{ij}^{(BP)}} \cosh(\beta K S + \beta h_j) \quad (2.18)$$

$$= \frac{2e^{\beta h_i S}}{Z_{ij}^{(BP)}} \cosh(\beta K) \cosh(\beta h_j) (1 + S \tanh(\beta K_{ij}) \tanh(\beta h_j)) \quad (2.19)$$

$$\propto \exp(\beta(h_i + u(h_j, K_{ij}))S) \quad (2.20)$$

と縮約される。ここに

$$u(h, K) = \frac{1}{\beta} \text{atanh}(\tanh(\beta h) \tanh(\beta K)). \quad (2.21)$$

である。よって可約性条件 (2.13) から、

$$H_i = h_i^{(j)} + u(h_j^{(i)}, K_{ij}) \text{ for } \forall i, j. \quad (2.22)$$

²理由は後ほど記す。

が必要である。また (2.12) 式の右辺は $\sum_{(ij)} = \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j(i)}$ から

$$(\text{右辺}) \propto \exp \left(\sum_{(ij)} \beta K_{ij} S_i S_j + \sum_i \sum_{j(i)} h_i^{(j)} S_i - (C-1) \sum_i H_i S_i \right) \quad (2.23)$$

となるので、もとの Hamiltonian との比較から

$$\sum_{j(i)} h_i^{(j)} = (C-1) H_i \quad (2.24)$$

$$K_{ij} = J_{ij} \quad (2.25)$$

となる。以上で全てのパラメータが求まった³。さらに (2.22) 式を用いて書き換えると

$$h_i^{(j)} = \sum_{k(i) \setminus j} u(h_k^{(i)}, J_{ik}) \quad (2.26)$$

$$H_i = \sum_{j(i)} u(h_j^{(i)}, J_{ij}) \quad (2.27)$$

となる。ここで $k(i) \setminus j$ は j を除く i から延びるボンドにわたる和であるとする。

実は (2.26), (2.27) 式は, **cavity 法** と呼ばれる手法によって評価した $H_i, h_i^{(j)}$ の満たす方程式と一致する。ここで cavity 法の詳細を論ずることはしないが, cavity 法は Onsager の反跳項をあらわに取り入れるために, 局所場を計算する際には近傍のサイト一つの影響を排除した場を cavity 場と定義し, その解析を行う。しかしこの BP 近似においては, 2 体分布までを扱っているために cavity 場に対応する場が自動的に入っている。すなわち, 相互作用 J_{ij} が二体分布に残っているため, i から見て j を排除している場が $h_i^{(j)}$ になったのだった⁴。よってこの意味において, 素朴な⁵ cavity 法は BP 近似に他ならない。

さて, 第 6 章との比較のために (2.26), (2.27) 式に一様性を仮定した上で⁶, ランダムネスに関する分布による表現に書き換える。ここでの一様性とは, $h_i^{(j)}$ たちがみな同分布に従うことを意味する。その分布を $\pi(h_i^{(j)})$ とおくと, (2.26) 式は

$$\pi(h_i^{(j)}) = E \int \prod_{k(i) \setminus j} dh_k^{(i)} \pi(h_k^{(i)}) \delta \left(h_i^{(j)} - \sum_{k(i) \setminus j} u(J_{ik}, h_k^{(i)}) \right) \quad (2.28)$$

となる。E は J_{ij} に対する期待値を表す。これをもう少し簡略化するため, 分布

$$\hat{\pi}(\hat{x}) := E \int dx \pi(x) \delta(\hat{x} - u(J_{ij}, x)) \quad (2.29)$$

を導入すると, (2.28) 式は, 関係式

$$\pi(x) = \int \prod_{\gamma=1}^{C-1} d\hat{x}_\gamma \hat{\pi}(\hat{x}_\gamma) \delta(x - \sum_{\gamma=1}^{C-1} \hat{x}_\gamma) \quad (2.30)$$

となる。(2.29), (2.30) 式は, 付録 A.1 にあるように, 2 体の疎結合 SG 模型のレプリカ対称な解析の結果と一致する。この結果は, 既に先行研究 [6] で述べられていたものである。

³導出としては, (2.12) 式の両辺の Kullback-Leibler 距離を計算し, それを最小化するようにパラメータを決定するもの [5] があり, そちらのほうがよりすっきりしていると思うが, ここでは計算の簡便さからこちらを選んだ。

⁴この事実は Bethe 格子上では次のように言うこともできる。隣接する 2 体 i, j の分布を計算するために $N-2$ 個のスピンを trace out する際, i につながっている j 以外のボンドからたどっていても, j にはたどり着かない。よって i の側に広がるスピンを trace out した効果のみが $h_i^{(j)}$ に表れる。

⁵レプリカ対称性の破れを導入しない, という意味

⁶この仮定は SG 模型の特徴を壊すほどに粗いものだと思われるが, 後に示すような結果を再現するための方便として導入する。

2.4 Thouless-Anderson-Palmer の自由エネルギー

前節で導出した局所場の方程式を、 $\beta \ll 1$ の仮定のもと局所磁化 $m_i = \tanh(\beta H_i)$ で書き換える⁷。 $O(\beta^2)$ で形式的に、

$$\begin{aligned} \tanh(\beta H_i) &= \tanh\left(\beta \sum_{j(i)} u(h_j^{(i)}, J_{ij})\right) \approx \sum_{j(i)} \tanh(\beta u(h_j^{(i)}, J_{ij})) \\ &= \sum_{j(i)} \tanh(\beta J_{ij}) \tanh(\beta h_j^{(i)}) = \sum_{j(i)} \tanh(\beta J_{ij}) \tanh(\beta (H_j - u(h_i^{(j)}, J_{ij}))) \\ &\approx \sum_{j(i)} \{\beta J_{ij} m_j - (\beta J_{ij})^2 (1 - m_j^2) m_i\} \end{aligned} \quad (2.31)$$

となる。最後の変形は加法定理を用いて展開した。この式は Thouless-Anderson-Palmer(TAP) 方程式と呼ばれるものと同一である [4]。彼らは、SK 模型の高温展開によって直接この式を導いた。一般に、第 6 章の疎結合模型のようにグラフ上のループの効果が $N \rightarrow \infty$ で消えてしまう模型であれば、BP 近似はよい解を与えることが期待される。そのような場合は、BP 方程式の高温展開として TAP 方程式を導くことができるため、BP 近似で止めてしまえば高温展開の必要はない。しかし d 次元の模型のように、BP 近似が厳密でない模型は多く存在するため、両者を状況に応じて使い分ける必要がある。

さて、一般に、(2.31) 式、もしくは (2.26) 式の解を得ることは困難であるが、さらに J_{ij} の構造として前述のフラストレーションとランダムネスが存在する SG 模型では、解が一意に決まることは期待できない。直感的には、全てのプラケットにフラストレーションが入っているわけではなく、フラストレーションのないもののうちのどのプラケットのエネルギーを下げるか、という自由度が存在するため、様々な配置があり得てしまう。実際、TAP 方程式の解の個数はサイズの指数関数として増加することが示されている [7]。またそれらの解を代入した自由エネルギーは平均場の意味で安定であるものも多く含まれるので、有限温度ではそのいずれもが物理的に意味のある解である⁸。その意味で、BP 近似は系の対称性ではなく“解の対称性”を破ることによって、すなわち Hamiltonian の持つ Z_2 対称性ではなく、各平均場解のうちからあらわに一つを選ぶことによって熱力学量を計算するような近似手法になっている。強磁性体模型であれば二つの解は完全に等価であったので、一方を手で選んで計算することに意味はあるが、SG 模型の場合、各解の与える自由エネルギーは等しいとは限らない。すなわち、このような近似によっては正しい熱力学量を評価できないはずである⁹。

例えば、図 2, 3 は低温相における強磁性体およびスピングラスの BP 自由エネルギーである。図 3 は、模式図として一つの例を示した。このような地形の場合、それぞれの谷に対応する BP 自由エネルギーを谷の中の状態の部分から定義される自由エネルギーと同一視することで、

$$e^{-\beta F} = Z = w_+ + w_- = 2 \cdot w_{\pm} = \exp(-\beta F_{\pm} + \log 2) \quad (2.32)$$

となる一方で、スピングラスの場合、 F にある谷の数が $\mathcal{N}(F)$ で、自由エネルギーの値は F_0 と F_1 の二値しかないとする、

$$e^{-\beta F} = Z = w_0 + \mathcal{N}(F_1) w_1 = w_0 \left(1 + \mathcal{N}(F_1) \frac{w_1}{w_0}\right) \quad (2.33)$$

となる。ただし w は分配関数の部分和である。先ほど述べたように、 $\mathcal{N}(F)$ はサイズの増加につれて指数関数的に増加する一方で、分配関数比 w_1/w_0 はサイズの増加と共に指数関数的に減少する。よってこの二つの競合が全状態和 F に現れることとなり、個々の谷での自由エネルギーの値 F_0, F_1 のみでは真の平衡での自由エネルギーを計算できない。

⁷ 樺島先生のセミナー (2008) を参考にした。

⁸ 強磁性体模型において $m > 0, m < 0$ のどちらも意味のある解であるのと同様。

⁹ もちろん BP 「近似」であるので、 d 次元模型では正しくないのだが、BP の手続きが exact になるような模型 (例えば Bethe 格子上の模型) においてさえ、という意味。

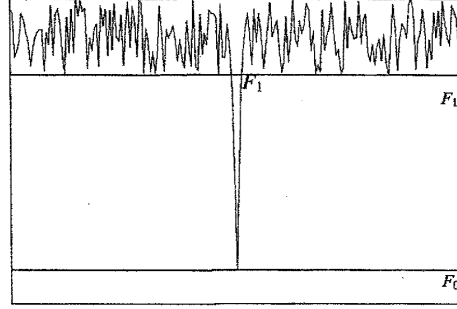
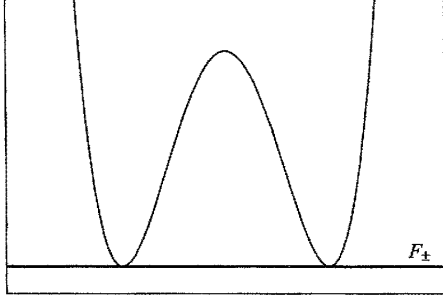


図 2: 強磁性体の BP 自由エネルギーの模式図. 図 3: スピングラス模型の BP 自由エネルギーの模式図.

このように, BP 近似によって, 「平均場解がたくさん出てきて, それらの間の“対称性”が破れている」ことがわかる. すなわち素朴な BP 近似では, その解の個数すべてを数え上げない限り解くことができない. そこで以下では BP 近似の枠組を離れ, 全結合模型である SK 模型に舞台を移して解析を進める.

3 Parisi 理論の概要

SK 模型の厳密解は Parisi によって提出された [8]. とはいえ, 当時は誰も彼の解が厳密だ, などとは思わなかっただろう. しかし彼の解析解は, 数値計算による検証にも 30 年近く耐え, 最終的には Talagrand によって数学的な証明が与えられるに至った [9]. すなわち, 彼の解は本質を完全に掴んでいたのである.

本章では彼の導出した解についてのレビューを行う. 特に, レプリカ対称性の破れ (Replica Symmetry Breaking, RSB) と呼ばれる概念を導入する.

3.1 全結合模型の解析とレプリカ法

3.1.1 Sherrington-Kirkpatrick 模型

Sherrington-Kirkpatrick 模型とは [10]

$$H_{SK} = -\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i < j} J_{ij} S_i S_j \quad (3.1)$$

で定義される全結合 SG 模型である. ここに $S_i = \pm 1$, $J_{ij} \sim N(0, 1)$ である. 以下では, SK 模型を拡張した K 体 SK 模型 [11]

$$H = -\frac{1}{\sqrt{N^{K-1}}} \sum_{i_1 < i_2 < \dots < i_K} J_{i_1 i_2 \dots i_K} S_{i_1} S_{i_2} \dots S_{i_K} \quad (3.2)$$

の解析を行う. ここに $J_{i_1 \dots i_K} \sim N\left(0, \frac{K!}{2}\right)$, $K \geq 2$ とする. また, 記号の簡略化のため, 集合

$$\mathcal{G}_K = \left\{ \mu = \{\mu(1), \dots, \mu(K)\}; \mu(i) \in \{1, 2, \dots, N\}, \mu(i) \neq \mu(j) (i \neq j) \right\} \quad (3.3)$$

を導入すると, (3.2) 式は

$$H = -\frac{1}{\sqrt{N^{K-1}}} \sum_{\mu \in \mathcal{G}_K} J_\mu \prod_{i \in \mu} S_i \quad (3.4)$$

となる. 文脈上明らかな場合, $\mathcal{G}_K = \mathcal{G}$ と書く.

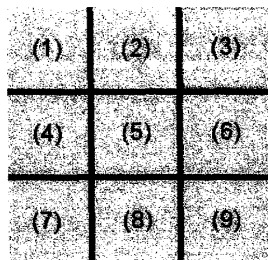


図 4: 自己平均性の議論.

3.1.2 自己平均性

この模型の物理量 A のランダム平均 $[A]$ を計算する. ランダム平均とは,

$$[A] := \int \prod_{\mu \in \mathcal{G}} \frac{dJ_{\mu}}{\sqrt{K!}\pi} e^{-\frac{J_{\mu}^2}{K!}} A(\mathbf{J}) \quad (3.5)$$

のことを意味する. この量を評価する理由は二つある. 一つは, ボンドの実現値を固定したままでは解析的な表現が困難であるという消極的なものだが, もう一つは**自己平均性**の議論による.

まず図4のように, マクロな系を考え, それをマクロな部分系に分割する. そして, 各部分系の Hamiltonian をバルクの部分と他の部分系との相互作用の部分に分ける. このときもし相互作用が無視できるならば, 大きな系はサブマクロな系の平均として表れるはずである. よって物理量は大数の法則から

$$\langle A \rangle = \sum_{i=1}^M \langle A \rangle_i \approx [\langle A \rangle] \quad (3.6)$$

となることが期待される. ゆえに, 熱力学極限における物理量はサンプル依存性を持たないため, 平均による評価が正当化される. 以上が自己平均性の議論である.

しかし SK 模型は全結合であるため, バルクと表面, という分類が存在しない. よってこの議論は素直に適用することはできないが, 実際に興味のある d 次元 SG 模型ではこの議論は成立するため, 自由エネルギーは SK 模型においても自己平均性を持つと考えられている. また情報理論での問題設定においては, そもそも平均的な性能評価をしたいことが多いため, 平均をとることがむしろ本質的である. そこでこれらの理由から本章では, 物理量のランダム平均を考察の対象とする.

3.1.3 レプリカ法

K 体 SK 模型の自由エネルギー $f = -\frac{1}{\beta} [\log Z]$ を解析する. $Z(\mathbf{J})$ を計算するのが難しかったので平均値を評価することになったのだから, 先にランダム平均を取らなければ何の意味もない. しかし, \log の平均を取るのは困難である. そこでこの困難を回避するために**レプリカ法**を用いる. レプリカ法の手続きとは以下のようなものである:

1. $n \in \mathbb{N}$ として, Tr を展開する.

$$[Z^n] = [\{\text{Tr} \exp(-\beta H(\mathbf{S}))\}^n] = \text{Tr}_1 \cdots \text{Tr}_n \left[\exp(-\beta \sum_{\alpha=1}^n H(\mathbf{S}^{\alpha})) \right] \quad (3.7)$$

2. ランダム平均をとり, n セットのスピンのに関する Hamiltonian H_{rep} を求める.

$$\left[\exp\left(-\beta \sum_{\alpha=1}^n H(\mathbf{S}^\alpha)\right) \right] = \exp(-\beta H_{\text{rep}}) \quad (3.8)$$

3. 関数

$$\phi(n) := -\frac{1}{N\beta n} \log[Z^n] = -\frac{1}{\beta n} \log \text{Tr}_1 \cdots \text{Tr}_n \exp(-\beta H_{\text{rep}}) \quad (3.9)$$

を熱力学極限において計算する.

4. ステップ 3 において計算した $\phi(n)$ の定義域を $n \in \mathbb{R}$ に拡大し, 恒等式

$$-\frac{1}{N\beta} [\log Z] = \lim_{n \rightarrow 0} \left\{ -\frac{1}{N\beta n} \log[Z^n] \right\} = \lim_{n \rightarrow 0} \phi(n) \quad (3.10)$$

に基づいて左辺の自由エネルギーを評価する.

ステップ 2 においてランダム平均を取っているため, ステップ 3 では計算上, ランダムネスのない系の自由エネルギーを評価するのと同等になっている. このことによって関数 $\phi(n)$ を評価することが可能になる. この手続きのうち一番の問題点はステップ 4 における定義域の拡大であるが, 通常ここでもっとも素朴に, ステップ 3 までは整数上の関数だったものを実数上でも使えると思ってしまう. この手続きは, しばしば「解析接続」と呼ばれるが, 複素関数論における解析接続とは異なることを付記しておく. 展開に基づいた接続ではないため, 若干長くはなるが「解析関数への接続」と言ったほうがよいのではないかと, 思っている. この数学的な問題点は 4 章で議論する. また, ステップ 1 で展開されて表れたスピン $\mathbf{S}^\alpha (\alpha = 1, \dots, n)$ をレプリカやレプリカスピンと呼ぶ.

3.1.4 レプリカ対称性の仮定

上記の手順に従って, レプリカ法を K 体 SK 模型に適用したときの結果を述べる. 詳細は教科書 [12] を参考にした. 前節のそれぞれの手続きに対応して, 以下のように計算される.

- 1.

$$[Z^n] = \text{Tr}_1 \cdots \text{Tr}_n \left[\exp \left(\frac{\beta}{\sqrt{N^{K-1}}} \sum_{\alpha=1}^n \sum_{\mu \in \mathcal{G}} J_\mu \prod_{i \in \mu} S_i^\alpha \right) \right] \quad (3.11)$$

- 2.

$$\exp(-\beta H_{\text{rep}}) = \exp \left(\frac{K! \beta^2}{4N^{K-1}} \sum_{\mu \in \mathcal{G}} \sum_{\alpha, \beta=1}^n \prod_{i \in \mu} S_i^\alpha S_i^\beta \right) \quad (3.12)$$

3. 実空間方向について一体化して, 下付きの空間添字を省略する. そして $N \rightarrow \infty$ における鞍点法を用いると, $n \in \mathbb{N}$ では

$$\phi(n) = \min_{q_{\alpha\beta}} \left\{ \frac{\beta(K-1)}{2n} \sum_{\alpha < \beta} q_{\alpha\beta}^K - \frac{\beta}{4} - \frac{1}{\beta n} \log \text{Tr} \exp \left(\frac{K\beta^2}{2} \sum_{\alpha < \beta} q_{\alpha\beta}^{K-1} S^\alpha S^\beta \right) \right\} \quad (3.13)$$

とできる. ここに鞍点を決める条件は,

$$q_{\alpha\beta} = \frac{\text{Tr} S^\alpha S^\beta \exp \left(\frac{K\beta^2}{2} \sum_{\alpha < \beta} q_{\alpha\beta}^{K-1} S^\alpha S^\beta \right)}{\text{Tr} \exp \left(\frac{K\beta^2}{2} \sum_{\alpha < \beta} q_{\alpha\beta}^{K-1} S^\alpha S^\beta \right)} \quad (3.14)$$

である. $q_{\alpha\beta}$ を重なり変数と呼ぶ.

ここまでに論理的な飛躍はないのだが、次のステップにおける定義域の拡大に、論理的な正当性を別にしても手続的な困難がある。和 $\sum_{\alpha < \beta}$ が $n \in \mathbb{N}$ の名残を引きずっているからだ。ここを足し上げねばならない¹⁰。

ここで、今の自由エネルギーに存在すべき**対称性**を考える。各レプリカは Tr の展開から出てきたものだから、その各々は等価である。よってそれらの間の重なり変数 $q_{\alpha\beta}$ はレプリカの添字によらない、と仮定するのは自然である。すなわち、

$$q_{\alpha\beta} = q \quad (3.15)$$

を仮定しても良さそうである。(3.15) 式を**レプリカ対称性** (replica symmetric, RS) の仮定と言う。このもとでは、レプリカ方向についても一体化することができて、結果として $n \in \mathbb{R}$ においても解釈可能な表式

$$\phi(n) = \frac{\beta(n-1)(K-1)}{4} q^K - \frac{\beta}{4} - \frac{1}{\beta} \log 2 + \frac{\beta K q^{K-1}}{4} - \frac{1}{\beta n} \log \int \text{Du} \cosh^n \left(\beta u \sqrt{\frac{K}{2}} q^{K-1} \right) \quad (3.16)$$

$$q = \frac{\int \text{Du} \tanh^2 \left(\beta u \sqrt{\frac{K}{2}} q^{K-1} \right) \cosh^n \left(\beta u \sqrt{\frac{K}{2}} q^{K-1} \right)}{\int \text{Du} \cosh^n \left(\beta u \sqrt{\frac{K}{2}} q^{K-1} \right)} \quad (3.17)$$

を得る。ただし $\text{Du} = \frac{du}{\sqrt{2\pi}} \exp(-u^2/2)$ である。

最後に $n \rightarrow 0$ の極限を取ることで、RS 仮定の元の自由エネルギー

$$F_{\text{RS}} = -\frac{\beta(K-1)}{4} q^K - \frac{\beta}{4} - \frac{1}{\beta} \log 2 + \frac{\beta K q^{K-1}}{4} - \frac{1}{\beta} \int \text{Du} \log \cosh \left(\beta u \sqrt{\frac{K}{2}} q^{K-1} \right) \quad (3.18)$$

$$q = \int \text{Du} \tanh^2 \left(\beta u \sqrt{\frac{K}{2}} q^{K-1} \right) \quad (3.19)$$

を得る。ただしその際、(3.19) 式で求まる鞍点は F_{RS} を最大化する点になってしまう。しかし他に候補がないため、この解をとりあえず認める。

3.2 レプリカ対称性の破れ

3.2.1 de Almeida-Thouless 条件とレプリカ対称性の破れ

前節で、RS 仮定を用いた自由エネルギーの評価について述べた。しかし本当に RS 仮定は正しいのであろうか。得られた温度の関数としての自由エネルギーが満たさねばならないものは、**熱力学的制約**である。例えば、離散スピン系のエントロピーは必ず正である必要がある。しかし (3.18) 式から SK 模型のエントロピーを導出すると、低温で負になることが示される [10]。すなわち RS 仮定は、どこかで破綻していなければならない。この事実を、レプリカ理論の中で実際に導出したのは de Almeida-Thouless による不安定性の議論である [13]。本小節ではその議論を簡単にレビューする。

まず、(3.13) 式に RS 解の回りの小摂動 $q_{\alpha\beta} = q + \eta_{\alpha\beta}$ を加え、 η について 2 次まで展開する。このとき、 η の一次の項は鞍点条件から消える。また 2 次の項は $\frac{n(n-1)}{2}$ 元の二次形式になる。平均場の不安定性とは、この二次形式の固有値のうちに負のものが出ることであつたので、それが起こるのか否かを調べ

¹⁰ n が整数のときは各レプリカの「個性」を尊重した表式であるが、それをまとめることで全体として意味のある結果を得たい。そのためには一種の統計操作 (数え上げ) が必要になる、ということなのかもしれない。

ばよいはずである。しかし、 $n \rightarrow 0$ の極限を取るときに鞍点まわりの凸性が反転していたので、逆に正の固有値が出ることが不安定化に対応すると考えられる。よって、二次形式の最大固有値を λ_{AT} とおくと、

$$\lambda_{\text{AT}} < 0 \quad (3.20)$$

が安定性条件である。 K 体 SK 模型の場合、この条件式は

$$\frac{K(K-1)}{2} \beta^2 q^{K-2} \int Du \cosh^{-4} \left(\beta u \sqrt{\frac{K}{2} q^{K-1}} \right) < 1 \quad (3.21)$$

となる。この式を AT 安定性条件と呼ぶ。鞍点方程式 (3.19) を解いて (3.21) 式に代入すると、 $T < T_c(K)$ で不安定化が起こっていることがわかる。そして $T_c(K)$ は、 K 体 SK 模型の SG 転移温度と一致する。

よって、なんらかの方法でレプリカ対称性の破れ (replica symmetry breaking, RSB) を伴った解を構成する必要があることがわかった。

3.2.2 階層的レプリカ対称性の破れ

RSB を導入する方法は幾通りにも考えられる。実際歴史的には様々な試みがなされてきたが、ここではそれを一足飛びにして、 K 体 SK 模型の場合の正解の候補を天下りの書き下す [8]¹¹。その正しさは次節で述べられる。

まず、レプリカ法の枠内で計算をするのであれば、 n についての接続が取れる必要がある。あまり勝手に $q_{\alpha\beta}$ の値を変えてしまうとそのような計算ができないから、レプリカ対称性をほどほどに保つような破れがよい。そこで、 $I_0 = \{0, 1, \dots, n-1\}$ と置き、これを次のようなグループに分ける。

$$I_0 = \bigcup_{a=0}^{n/m-1} I_1^{(a)}, \quad I_1^{(a)} = \{ma, ma+1, \dots, m(a+1)-1\} \quad (3.22)$$

そして $\alpha, \beta \in I_1^{(a)}$ ならば $q_{\alpha\beta} = q_1$ 、そうでないなら $q_{\alpha\beta} = q_0$ と置く。このようにして導入された、重なり変数のグループへの分け方を特徴付ける変数 m を分割変数と呼び、この鞍点を、一段階 RSB (1step RSB, 1RSB) 解と呼ぶ。このときの $q_{\alpha\beta}$ を行列の形にして表示すると、例えば $n=6, m=3$ のとき

$$(q_{\alpha\beta}) = \begin{pmatrix} 1 & q_1 & q_1 & q_0 & q_0 & q_0 \\ q_1 & 1 & q_1 & q_0 & q_0 & q_0 \\ q_1 & q_1 & 1 & q_0 & q_0 & q_0 \\ q_0 & q_0 & q_0 & 1 & q_1 & q_1 \\ q_0 & q_0 & q_0 & q_1 & 1 & q_1 \\ q_0 & q_0 & q_0 & q_1 & q_1 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.23)$$

のようになる。よって行列 $(q_{\alpha\beta})$ を行数 m の副行列に分割したと言える。構成から、 $q_0 = q_1$ もしくは $m=1, n$ のときに RS を回復する。特に $m=n$ のとき RS を回復するという事実は、5章の鍵となる。

このとき、2つの補助変数を導入することで (3.13) 式はやはり一体化される。その結果は

$$\begin{aligned} -\beta F_{1\text{RSB}} &= \frac{m\beta^2}{4} (K-1) q_0^K + \frac{(1-m)\beta^2}{4} (K-1) q_1^K + \frac{\beta^2}{4} + \log 2 \\ &\quad - \frac{\hat{q}_1}{2} + \frac{1}{m} \int Du \log \int Dv \left\{ \cosh^m(\sqrt{\hat{q}_0} u + \sqrt{\hat{q}_1 - \hat{q}_0} v) \right\} \end{aligned} \quad (3.24)$$

¹¹個人的にはこれが RSB の “the solution” だとは思っていない。磁場無し、平均場、熱力学極限でのバルク量を計算するにはたまたまこれで十分だった、という理解をしている。言い換えれば、平均場模型を越えて RSB を拡張したり、有限サイズ効果を解析的に評価したり、磁場中 SG の諸問題を解決したりするのはみな open question であると思う。

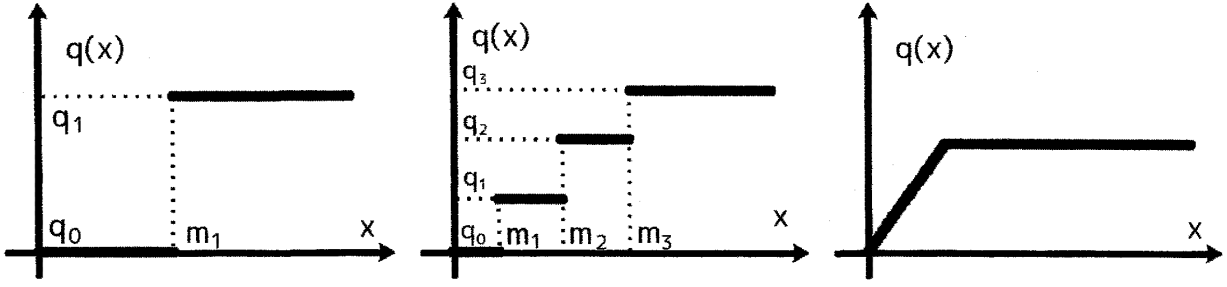


図 5: $q(x)$ の模式図. 左から順に 1RSB, 4RSB, FRSB を表す.

である. ただし $\hat{q}_i = \frac{\beta^2}{2} K q_i^{K-1}$ である.

1RSB 解についても同様に AT 解析を行うことができる. 特に $T \lesssim T_c(K)$ における安定性が興味の対象である. 実際実行してみると, $K = 2$ のときは AT 不安定性は緩和するものの依然不安定なままである一方で, $K > 2$ では AT 不安定性は解消し, 1RSB 解が平均場の意味で安定である. これらの事実から, $K > 2, T \lesssim T_c(K)$ では 1RSB で自由エネルギーが記述できていると考えられる. さらに $K > 2$ で鞍点方程式を解くと, 外場のない限り $q_0 = 0$ となることも示される. この事実は必ずしも自明ではないが, 5章で提示する構成に則れば非常に自然な帰結になっていることを付記しておく.

しかし, 温度を十分下げると, $K > 2$ であっても再び 1RSB 解は AT 不安定化する. これを **Gardner 転移** と呼び, その転移温度を Gardner 転移温度 T_G と書く. よって 1RSB 解がもともと不安定だった $K = 2$ の場合と合わせて, さらに RSB を導入したい. それは, 1RSB の対称性の破りかたを再帰的に用いればよい. m を m_1 と書き集合の要素を mod m_1 で書くことにすると, $I_1^{(a)} \equiv I_1$ なのでこれを次のように分割する.

$$I_1 = \bigcup_{a=0}^{m_1/m_2-1} I_2^{(a)}, \quad I_2^{(a)} = \{m_2 a, m_2 a + 1, \dots, m_2(a+1) - 1\} \quad (3.25)$$

そして 1RSB において q_1 だった重なり変数のうち, $\alpha, \beta \in I_2^{(a)}$ ならば $q_{\alpha\beta} = q_2$ とおく. このようにして構成される解を 2 段階 RSB 解と呼ぶ. 以降同様に $I_p^{(a)}$ を定め, q_p と m_p を導入したものを p 段階 RSB(p RSB) 解と呼び, 解の列 $F_{p\text{RSB}}$ の極限 $\lim_{p \rightarrow \infty} F_{p\text{RSB}}$ を完全 RSB(full RSB, FRSB) 解と呼ぶ. また, 以下の便宜のため p RSB のとき, m_1, m_2, \dots および q_1, q_2, \dots を用いて

$$q(x) = q_0 \quad (0 \leq x \leq m_1) \quad (3.26)$$

$$q(x) = q_1 \quad (m_1 \leq x \leq m_2) \quad (3.27)$$

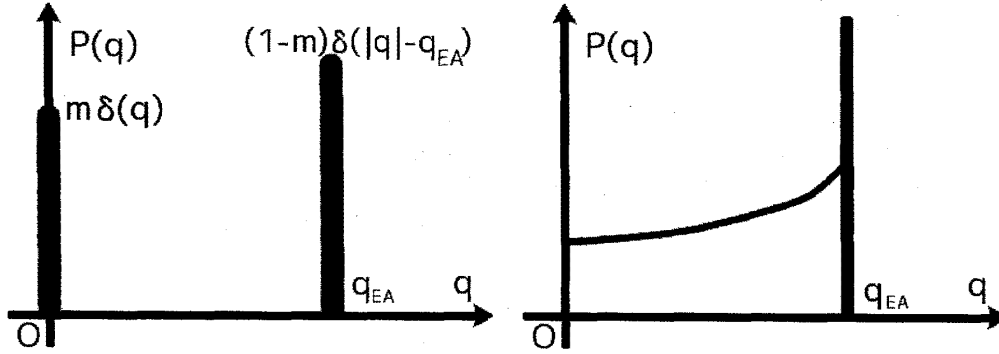
$$\vdots \quad (3.28)$$

$$q(x) = q_p \quad (m_p \leq x \leq 1) \quad (3.29)$$

なる関数 $q(x)$ を導入しておく. FRSB のときは値が連続的に変化するので, 典型的な形は図 5 のようである.

$K = 2, T \lesssim T_c(2)$ および $K > 2, T \lesssim T_G(K)$ の場合, p RSB においてどんなに p を大きくしても AT 不安定性は解消されないが, $p \rightarrow \infty$ の極限で AT 不安定性条件 (3.21) の両辺に等号が成立する. すなわち, FRSB 解は marginal で解の候補になっている.

以上より $K = 2$ のときは全低温相で FRSB, $K > 2$ のときは $T_G < T < T_c$ で 1RSB, $T < T_G$ で FRSB が解の候補であることがわかった.


 図 6: 重なり変数の分布 $P(q)$ の模式図. $K = 3$ (左図) と $K = 2$ (右図).

3.2.3 物理量との対応

前節では RSB 解を構成したが, 次はこの理論の予測するところを検証しなければならない. すなわち, 解の性質がクリアに現れる物理量を計算して, 数値実験などと比較する必要がある. そこで, この構成における“秩序関数” $q(x)$ は物理量とどのように対応するのかについて述べる.

重なり変数は, RSB のもとでは多様な値を持つが, これがどのような現象に対応するのかは自明ではない. しかし [14] において, この現象は TAP 方程式の解の多重性に対応していることが示された. すなわち RSB とは, 2 章で述べたように様々な平均場解が存在している状態に他ならない. よって重なり変数のレプリカ法による表式 [15]:

$$\langle q^l \rangle = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n(n-1)} \sum_{\alpha \neq \beta} \langle S_1^\alpha S_1^\beta \cdots S_l^\alpha S_l^\beta \rangle \quad (3.30)$$

を, $q(x)$ および $q^{-1}(q) = x(q)$ で評価したもの

$$\langle q^l \rangle = \int q(x)^l dx = \int q^l \frac{dx}{dq} dq \quad (3.31)$$

は, TAP 自由エネルギーの複雑な地形を反映した, SG の特徴をよくとらえている量である. この最右辺に含まれる微分 $\frac{dx}{dq}$ はレプリカ法によって決定可能な量であり, 仮定した鞍点の形から 1RSB, FRSB それぞれの微分を評価すると図 6 のようになる. 特に 1RSB の時は, 二つの δ 関数の重ねあわせであり, 大きなほうの重なり変数 q_1 を q_{EA} と書く. また一般に, $P(q)$ の定義域の最大値を Edwards-Anderson 秩序変数 q_{EA} と書く.

一方

$$\langle q^l \rangle = \int q^l P(q) dq \quad (3.32)$$

によって $P(q)$ を定義すると, これは平衡における q の分布の熱力学極限である. (3.31), (3.32) の両式を等置すると,

$$P(q) = \frac{dx}{dq} \quad (3.33)$$

が導かれる. この右辺はレプリカ法によって決定可能な量であり, 左辺は重なり変数の分布という数値的に測定可能な量である. よってこの両者およびそのモーメントを比較することができる. $K = 2$ については Parisi が解を提出した 3 年後という非常に早い段階で検証がなされ, 肯定的な結果を得た [16]. 一方 $K = 3$ についての検証は筆者は寡聞にして知らない¹². このようにして, Parisi 解は数値的に検証され, 定性的にも定量的にも K 体 SK 模型を記述する解であることが支持されていった.

¹²6 章では, 疎結合ではあるが, 3 体相互作用模型における $P(q)$ の直接計算を行っている. その結果, 1RSB で解が記述できることに對しては肯定的な結果を得た.

4 レプリカ法の正当化に関する数学的困難

レプリカ法は、3.1 節で導入された。しかしこの計算を見てもなお「レプリカ法は正しい」と言い切れるのは、よほどわかっている人か盲目的にものを信じる人かのどちらかだろう。筆者も多分に洩れずレプリカ法の正当性についていまだ疑っている。しかし、信じられないのならば証明をつけよ、とは先人の言であるし¹³、たとえその正当性を信じられなくとも、知りたい量について何らかの定量的な予測を与えてくれる手法ではあるのだから、そのようなレプリカ法について、数理的な考察を行うことは決して無意味なことではないと思う。

そこで本章では、レプリカ法の数理的側面についての先行研究をまとめ、考察する。特に“解析接続”とは何を意味するのか、ということを考えている。また、レプリカ法の恒等式に従い $n \rightarrow 0$ の極限を取ることと執着しすぎると、正しい解析から遠ざかっていってしまうだろうことが示唆される。

4.1 “解析接続”の意味するところ

van Hemmen-Palmer によるレプリカ法の正当化の試み [17] をレビューしながら、問題とされている点について整理したい。また熱力学極限の問題も議論するため、本節でのみ

$$\phi_N(n) = -\frac{1}{N\beta n} \log[Z^n] \quad (4.1)$$

$$\phi(n) = \lim_{N \rightarrow \infty} \phi_N(n) \quad (4.2)$$

と再定義する。van Hemmen-Palmer によれば、非自明な手続きは全部で 3 つある。

1. $\lim_{N \rightarrow \infty} \phi_N(n) (n \in \mathbb{N})$ を評価する。
2. $\phi(n)$ を実数に接続する。
3. $\phi(0) = \lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{n \rightarrow 0} \phi_N(n)$ を示す。

しかし、平均場模型に限定すれば、1 番は鞍点近似によって評価できる¹⁴。そこで以下では、問題 2 を接続の問題、問題 3 を極限交換の問題と呼び、それぞれ議論する。

4.2 極限交換の問題

順序は違うが、先にこの問題について考える。 ϕ を熱力学極限で評価することしかできない以上、この問題は避けて通れない。しかし、Griffiths の補題はこの問題を見事に解決する。

補題 4.1 (Griffiths)

$f_N(x)$ を $[a, b]$ 上定義された上に広義凸な関数列とする。このとき、 $\lim_{N \rightarrow \infty} f_N(x) = f(x)$ for $\forall x$ ならば $f(x)$ は広義凸。(よって連続) さらに $f'(x)$ が連続な点では、その点を c とすると

$$\lim_{N \rightarrow \infty} f'_N(c) = f'(c) \quad (4.3)$$

が成立する。

証明は原論文 [18] にある。さて、これを用いるため、 $\phi_N(n)$ の性質を調べる。まず

¹³ もちろん証明をつけられはしないのだが…

¹⁴ 鞍点の選びかた、特に $n \geq 1$ では常に RS でよいのか、というのは議論の対象かもしれないが、 $n \in \mathbb{N}$ では比較的容易に解析ができるため、問題ごとに対応するのがよいと思う。

命題 4.1 (ϕ の基本的性質)

- (1) $\phi_N(n)$ は単調減少関数である.
 (2) $n\phi_N(n)$ は上に凸な関数である.

証明

いずれも Hölder の不等式を用いて示すことができる.

- (1) $n < m$ なら $[Z^n]^{1/n} < [Z^m]^{1/m}$ であるから, 辺々 \log を取って $-1/\beta$ 倍すると,

$$\phi_N(n) = -\frac{1}{\beta n} \log[Z^n] > -\frac{1}{\beta m} \log[Z^m] = \phi_N(m) \quad (4.4)$$

- (2) $n < m$, $0 < \alpha < 1$ とする. $l = \alpha n + (1 - \alpha)m$ とおくと,

$$[Z^l] = [Z^{\alpha n} \cdot Z^{(1-\alpha)m}] < [Z^n]^\alpha [Z^m]^{1-\alpha} \quad (4.5)$$

なので, 辺々 \log をとって $-1/\beta$ 倍すると

$$\begin{aligned} (n\alpha + m(1 - \alpha))\phi(n\alpha + m(1 - \alpha)) &= -\frac{1}{\beta} \log[Z^l] \\ &> -\frac{\alpha}{\beta} \log[Z^n] - \frac{1 - \alpha}{\beta} \log[Z^m] = \alpha(n\phi(n)) + (1 - \alpha)(m\phi(m)) \end{aligned} \quad (4.6)$$

となる. よって示された.

この命題の (2) から, $n\phi_N(n)$ の極限 $n\phi(n)$ もまた広義凸であり, $\frac{d(n\phi(n))}{dn}$ が $n = 0$ で連続ならば極限交換が可能であることがわかる. また, この連続性が必要とされるのは, $\phi(n)$ の原点での微分可能性を仮定すると

$$\frac{d(n\phi(n))}{dn} = \phi(n) + n\phi'(n) \quad (4.7)$$

からも明らかであろう. $n = 0$ での $\phi(n)$ の連続性と Griffiths の補題の連続性の条件はほとんど等価であり, 連続性がなければレプリカ拡張した世界 $\phi(n)$ と自由エネルギーの間に関係がなくなってしまうということを述べている. $n = 0$ に素直につながっていなければ, 極限交換以前の段階でレプリカ法は失敗してしまうだろうから, そのような場合についての考察は無意味である¹⁵. よって問題は $\phi(n)$ を正しく接続すること一点に集約された¹⁶.

4.3 接続の問題

レプリカ法に関する数学的困難は, 大方の予想通り以下の問題に集約される.

問題

$\phi(n) (n = 1, 2, 3, \dots)$ が与えられたとして, $\phi(n) (n \in \mathbb{R})$ を求めよ.

この接続問題に対する van Hemmen-Palmer の解答は, Carlson の定理に訴えるものである.

定理 4.1 (Carlson)

$f(z)$ が $|\arg z| \leq \pi/2$ で一価正則で $f(z) = O(e^{k|z|}) (k < \pi)$ とし, $f(n) = 0 \quad (\forall n \in \mathbb{N})$ とすると, $f(z)$ は右半面で恒等的に 0.

¹⁵ 数学的には必ずしも自明ではない. $n = 0$ からの展開が, $N \rightarrow \infty$ で一様収束していれば連続性の問題は肯定的に解決される. ただ今の問題設定の場合, 普通の高温展開とは異なりクラスター展開の形で書くことができないのがネックとなり, 数理物理的な手法で連続性の証明まで持っていくには何かアイデアが必要になる.

¹⁶ 少々虫のいい論理としては, 「 $\phi(n)$ を正しく接続しなくても $\phi(0)$ さえ得られればよいのであって, $\phi(n)$ 丸ごとを得る必要などない」というものがあるかもしれない. しかしそれは, レプリカ法を使わずに問題を解け, というのとほぼ同じであろう.

これを用いれば接続の一意性が示されるため、エイヤツと接続したものは正しいと言えるはずである。しかし条件 $f(z) = \mathcal{O}(e^{k|z|}) (k < \pi)$ は SK 模型の RS 解が満たすことはないため、SK 模型ではこの定理を用いることができない、というのが、Carlson の定理でレプリカ法の正当化をしようとした時に支障を来す原因である——と考えられることが多いと思う。しかし問題はそこではない。もっと根本的な問題として、多くの場合 $\phi(n)$ は右半面すべてでは解析的ではないのである。この事実は 5 章での主題に直結する問題であるためここでは述べないが、とにかく右半面すべてでの正則性、という非常に強い条件を課することはできない。

ということは、接続について厳密に何事かを言わんとしても条件が足らなすぎる、という状況になっているのがわかる。これは点列 $1, 2, 3, \dots$ の集積点が無限遠点である一方で、極限を取りたいのは $n = 0$ である、という非常に無理のある状況設定がおもな原因であると考えられる。すなわち、点列の情報から構成できる $\phi(n)$ の解析的性質は、素朴には無限遠点での展開のみだということだ。 $n = \infty$ から展開していっても、 $n = 0$ にたどり着く前には収束半径を上回る、という問題を解決するためには強い仮定を課したいが、現実の問題群はそれを許してくれない。

このようにレプリカ法の数理的側面について考察をしていくと、問題の構造が通常の統計力学と相似になっていることがわかる。熱力学極限における模型の振舞を、よくわかる側から展開することで計算したいが、どこかで特異性がある以上潜れない。これはまさに相転移のためであって、その有無は熱力学極限の解析にとって本質的である。次章では、有限レプリカ数における特異性についての考察を行い、それが RSB と密接に関連していることを見る。

5 有限レプリカ数でのレプリカ対称性の破れ

レプリカ法に RSB を手で入れる議論からは、「答えが出れば万事よし」という感覚を抱く。だからそれを可能な限り排除したい——。

それが本研究を始めた一番の動機である。そこで本章ではまず、レプリカ法を再解釈することから始める。その中でレプリカ法は、一種の「二重統計」の問題を解く一般的な枠組として機能することを見る。また、その二重統計に存在する熱力学をあらわに考察することで、それがレプリカ法の構造に対して強力な制約を加えていることを明らかにする。さらにその必要条件としての熱力学は、ある場合にはそれだけで問題の非自明な部分の構造をほぼ完全に決めてしまう能力があることを、具体的な模型を用いた解析によって示す。

5.1 レプリカ法の再解釈と拡張

前章で行ったレプリカ法についての数理的考察の中で、接続の問題と一般的な統計力学の問題設定との類似性を見た。実はこれは偶然ではなく、レプリカ法という手法が一種の“有限温度拡張”とみなせることを意味している [19]。 $\phi(n)$ の定義は

$$\phi(n) = -\frac{1}{N\beta n} \log[Z^n] = -\frac{1}{N\beta n} \log[\exp(-\beta n F)] \quad (5.1)$$

と書き直すことができる。 F は自由エネルギーである。これはまさに、自由エネルギー $F(\mathbf{J})$ を Hamiltonian だと思い、各 \mathbf{J} の配位ごとに重み $\exp(-\beta n F)$ を与えたときの自由エネルギーと相似である。その意味で $\phi(n)$ は「自由エネルギーの自由エネルギー」のような量である。一般に自由エネルギーは系の統計的振舞をほぼ完全に記述するから、 F が与える熱ゆらぎについての情報をランダムネスの重み $\exp(-\beta n F)$ を通して評価している $\phi(n)$ は、これらのゆらぎの情報を完全に含んでいるはずである。以下では関数 $\phi(n)$ を、 F と区別するために確率論の言葉を用いて、**キュムラント母関数**と呼ぶ¹⁷。

¹⁷レプリカ自由エネルギーと呼ぶこともあるが、多くの文献で、 n を示強変数として見るときにはキュムラント母関数と呼び、示量変数として見るときにはレプリカ自由エネルギーと呼ぶ傾向があるように思う。

キュムラント母関数は、よく知られているように、 n に関する微分をして $n \rightarrow 0$ とするとキュムラントが現れる。今は定義に $1/n$ をいれているので、 r 階の微分からは $r+1$ 次のキュムラントが得られる。よって特に、

$$\lim_{n \rightarrow 0} \phi(n) = \phi(0) = -\frac{1}{\beta} [\log Z] \quad (5.2)$$

となり、これはレプリカ法の恒等式である。また高階の微分からは高次のゆらぎが得られることもわかる。その意味で、 $\phi(n)$ はその $n=0$ 近傍での関数形自体に興味のある対象である。

この結果はさらに拡張され、一サイトあたりの自由エネルギー f の、ランダムネスに関する確率分布 $P(f)$ の評価にも用いられる。まず

$$\begin{aligned} -\beta n \phi(n) &= \frac{1}{N} \log[Z^n] = \frac{1}{N} \log \int P(f) \exp(-\beta n N f) \\ &\approx -\min_f \{I(f) + \beta n f\} \end{aligned} \quad (5.3)$$

と変形する。ここで

$$I(f) := -\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log P(f) \quad (5.4)$$

はレート関数と呼ばれる。このとき (5.3) 式は Legendre 変換になるので、 I の凸性を仮定すると Legendre 逆変換によって [20]

$$I(f) = \max_n \{\beta n \phi(n) - \beta n f\} \quad (5.5)$$

が得られる。 $I(f)$ は、自由エネルギーのゆらぎをサイズの主要項で記述することのできる量である¹⁸。

5.2 熱力学的制約

前節の議論は、 I をエントロピー的な量と解釈すれば、ランダムネスに関する統計力学に他ならないため、 $\phi(n)$ の解析には従来の統計力学的研究における様々な蓄積を用いることができる。実際、摂動論的手法は様々な研究において用いられてきた [19, 20, 21]。しかし摂動論では特異性を越えられない。 n についての接続を得るためには、 $\phi(n)$ の大域的な振舞を統制する必要がある。この一般には困難である作業が、熱力学的な制約によって達成されうること示すのが、本節の主眼である。

鍵となるのは、4 章命題 4.1 で既に示した二つの不等式¹⁹

$$(1) \phi'(n) \leq 0 \quad (5.6)$$

$$(2) (n\phi(n))'' \leq 0 \quad (5.7)$$

である。これらは、(1) エントロピーの単調性、(2) 比熱の正值性と対応していて、一般的に成立する不等式である。もしこのうち、(1) の単調性条件が marginal になる、すなわち $\phi'(n_m) = 0$ を満たす $n_m > 0$ が存在した場合どうなるか考える。まず、単調性から $n < n_m$ に対して

$$\phi(n) \geq \phi(n_m) \quad (5.8)$$

である。また凸性から、 $n\phi(n)$ は $n = n_m$ における接線で上から押さえられる。 $(n\phi(n))' = n\phi'(n) + \phi(n)$ および $\phi'(n_m) = 0$ から、

$$n\phi(n) \leq (n_m\phi'(n_m) + \phi(n_m))(n - n_m) + n_m\phi(n_m) = \phi(n_m)n \quad (5.9)$$

となる。よって $n > 0$ に限れば

$$\phi(n) \leq \phi(n_m) \quad (5.10)$$

¹⁸熱力学極限では自己平均性によって f はある実数値に収束すると考えられるが、有限サイズにしたときにはランダムネスによるゆらぎを持つ。

¹⁹微分で書いたのは、そのほうが簡単に議論できるからである。単調性と凸性のままでも同じ結論が得られる。

である。(5.8), (5.10) を同時に満たすためには,

$$\phi(n) = \phi(n_m) \text{ for } 0 < n < n_m \quad (5.11)$$

でなければならない.

これより, 以下の命題が導かれた.

命題 5.1 $\phi'(n_m) = 0$ for $n_m > 0$ ならば, $\phi(n) = \phi(n_m)$ for $0 < n < n_m$.

この命題は, $\phi(n)$ についての仮定 $\phi'(n_m) = 0$ および熱力学のみを用いて, n が有限の世界から $n = 0$ の物理的な極限への接続をしている, とみなすことができる. 熱力学的制約というレプリカ法の必要条件のみで接続を作った, と言い換えることもできるだろう. これによって, Hamiltonian の形や結合の分布などの模型の詳細によらずに, 統一的な議論をすることが可能になるため, 例えば磁場中や有限次元系でも, 命題 5.1 自体は成立する.

そこで次に問題になるのは, 「 $\phi'(n_m) = 0$ は成り立つのか? 成り立つのならばどんな時か?」という点である. この問題について, ふたたび K 体 SK 模型を具体例として用いて, 考察をしたい.

5.3 K 体 Sherrington-Kirkpatrick 模型における単調性の破れ

一般論として命題 5.1 を示したが, $\phi(n)$ を具体的に与えることができなければこれはまったくの general nonsense である. そこで, $\phi(n)$ を既に計算してきた K 体 SK 模型において, 単調性の破れが起こるのかどうかを議論したい.

まずは Parisi の RSB 解に目をつぶり, RS 解のみが与えられていると思う. RS 解は少なくとも $K = 2$, n が整数の時は正しいことが示されているので [17], n が十分大きければ実数上でも正しいことを仮定する. すなわち, (3.17) 式を $\phi_{RS}(n)$ とおいて,

$$\phi(n) = \phi_{RS}(n) \text{ for real } n \gg 1 \quad (5.12)$$

を仮定する. そしてこの解がどこまで使えるのか, n をどこまで小さくすると RS 仮定がまずくなるのか, と考えることにする.

RS 仮定が破綻する理由は, 既に議論してきたように, AT 不安定化であると考えられている. よってこの場合も, 最大固有値をレプリカ数有限で計算した AT 安定性条件

$$\lambda_{AT}(n) = 1 - \frac{K(K-1)}{2} \beta^2 q^{K-2} \frac{\int Du \cosh^{n-4} \left(\beta u \sqrt{\frac{K}{2}} q^{K-1} \right)}{\int Du \cosh^n \left(\beta u \sqrt{\frac{K}{2}} q^{K-1} \right)} > 0 \quad (5.13)$$

が marginal になることによって RS 仮定が破れ, RSB が起こると考えるのが自然である. そこで, n_{AT} を $\lambda_{AT}(n_{AT}) = 0$ で定める. またこれとは独立に, RS 解が正しいと主張するためには, RS 解もまた熱力学的制約の中になければならない. すなわち

$$\phi'_{RS}(n) \leq 0 \quad (5.14)$$

$$(n\phi_{RS}(n))'' \leq 0 \quad (5.15)$$

が必要である. 特に単調性を破る点 n_m を $\phi'_{RS}(n_m) = 0$ で定める. ただし, K 体 SK 模型の場合凸性は破れないためここでは定めない. そしてこれら三つの制約が満たされているときはいつでも, RS 解は正しいと仮定する²⁰.

以上で解析に必要な仮定が出揃った. 仮定として

²⁰この仮定は粗っぽいと思われるかもしれない. しかし従来の研究では, Kondor[21] を除いては, 熱力学的制約に見向きもしなかったことを鑑みれば, むしろ精度は上がっているはずである.

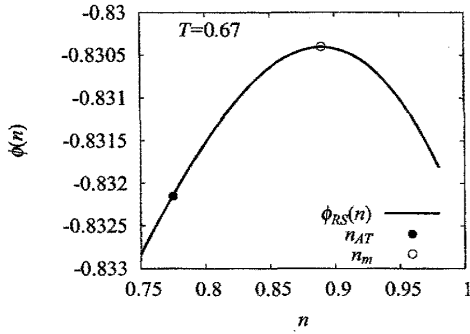


図 7: $T = 0.67$ における 3 体 SK 模型の $\phi_{RS}(n)$. RS 解の AT 安定性が破れる点 n_{AT} を塗りつぶした丸で, 単調性が破れる点 n_m を白抜きの丸で表した.

1. $\phi(n) = \phi_{RS}(n)$ for real $n \gg 1$

2. RS 解は (5.13), (5.14), (5.15) を満たすとき, かつその限りにおいて真の $\phi(n)$ と一致する.

を置く. 特に Parisi 型の RSB の導入など, 従来行われるような “手で” 関数形を作るようなことはしていないことを特記したい. このもとでは, $\phi_{RS}(n)$ を $n = 0$ に向けて拡張していく際, 三つの条件 (5.13), (5.14), (5.15) のうちいずれかの不等式が marginal になれば RS 解は破綻する. AT 不安定性および単調性の破れの条件を実際に確認するため, $K = 3$ のとき 温度を $T = 0.67$ に固定して, n_m と n_{AT} を計算した. それを示したのが図 7 である. ここからわかることは, AT 安定性が破れるよりも大きな n で実際に単調性が破れていることである. すなわち我々の置いた仮定の下では単調性の破れが実際に起こることがわかるため, 命題 5.1 より $0 < n < n_m$ の範囲で真の $\phi(n)$ は定数 $\phi(n_m)$ であることがわかる.

そこで次に, n_m と n_{AT} の温度依存性を図 8 にプロットした. $K = 2$ と $K \geq 3$ では, グラフの様子が定性的に異なることがわかる. $T = T_c$ において, $K = 2$ では $n = 0$ に向かう一方, $K \geq 3$ は $n = 1$ に向かう. また, $K \geq 3$ では二曲線が交点を持つが, $K = 2$ では持たない. そこで, $K \geq 3$ のとき $n_m(T) = n_{AT}(T)$ となる温度を T_G とおく. また, $K \geq 3$, $T \lesssim T_c$ では確かに単調性が破れるが, さらに温度を下げていくと AT 安定性が先に破れていることがわかるため, そのとき $\phi(n)$ は定数関数のような簡単なものでは接続されない.

さて, この現象は何を意味するのであろうか. まず $n = 0$ へ接続されている $T_G < T < T_c$ の領域について考えるため $K \geq 3$ とする. この温度領域において自由エネルギーは, レプリカ法の恒等式によって

$$F = \lim_{n \rightarrow 0} \phi(n) = \phi_{RS}(n_m) = \max_n \phi_{RS}(n) \quad (5.16)$$

と書かれる. 最右辺は, 単調性を破る点は RS 解の極大を与えることからこのように書いた. さらに, ϕ_{RS} には解析的な表式 (3.17) があるため, これを用いて書き下すと

$$F = \frac{\beta(n_m - 1)(K - 1)}{4} q^K - \frac{\beta}{4} - \frac{1}{\beta} \log 2 + \frac{\beta K q^{K-1}}{4} - \frac{1}{\beta n_m} \log \int Du \cosh^{n_m} \left(\beta u \sqrt{\frac{K}{2}} q^{K-1} \right) \quad (5.17)$$

となる.

一方 Parisi 理論では $T \lesssim T_c$ では 1RSB 解が正しいと考えられていたので, それも書き下す. ただし $q_0 = 0$ が得られることがわかっているため, それを先に課してしまうと,

$$F = \frac{\beta(m - 1)(K - 1)}{4} q_1^K - \frac{\beta}{4} - \frac{1}{\beta} \log 2 + \frac{\beta K q_1^{K-1}}{4} - \frac{1}{\beta m} \log \int Du \cosh^m \left(\beta u \sqrt{\frac{K}{2}} q_1^{K-1} \right) \quad (5.18)$$

と書ける²¹. 両式 (5.17), (5.18) を見比べると, 対応を

²¹ $q_0 = 0$ の元では, 二重積分の一方はただの Gauss 積分になってしまうので解析的に実行できる.

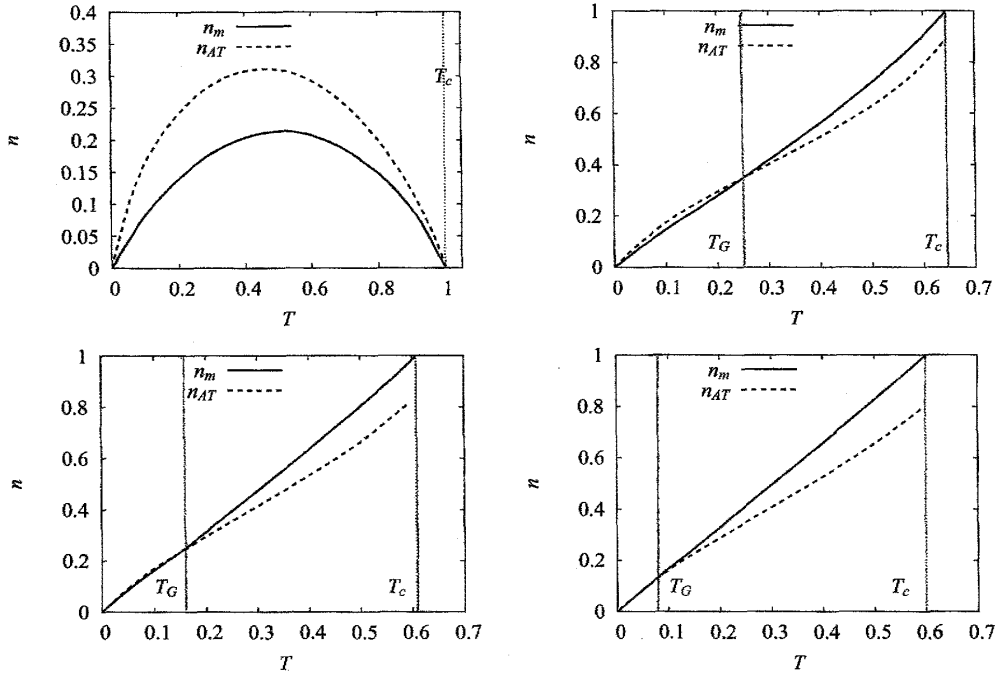


図 8: 単調性の破れの点 n_m (実線) と AT 安定性の破れの点 n_{AT} (破線) の温度依存性. 左上, 右上, 左下, 右下の順に, $K = 2, 3, 4, 5$.

- $n_m \Leftrightarrow m$
- $q \Leftrightarrow q_1$

で取れば, 形式的に等しい表式になっていることがわかる. この形式的な対応は, 重なり変数の分割 m を行数 n と等しく置けば, 分割していないのと同じであることから明らかであろう. しかも q, q_1, m はみな秩序変数だったから F を最大化するように決定していた上, n_m は定義から $\phi_{RS}(n)$ を最大化するように決まっていた. 以上より, 我々が Parisi 解をカンニングせずに構成した解 $F = \phi(n_m)$ は, Parisi の 1RSB 解と等しいものであることが示された. その接続の模式図を図 9 に示す. このように, キュムラント母関数にかかる熱力学的制約をあらわに考慮することで, RS 解のみを用いて 1RSB 解を導出することができた. このような 1RSB 解の構成法を, 以下では 1RSB 解の熱力学的構成と呼ぶことにする.

次に, $T = T_G$ で何が起こるのか考える. たった今 $\phi(n_m)$ は 1RSB 解に対応することが示されたため, $n = n_m(T)$ 上で評価した RS 解は 1RSB 解と等価である. また, $T = T_G$ では $n = n_{AT} = n_m$ において RS 解の AT 不安定化が起こる. この二つの事実を合わせると, $T = T_G$ で 1RSB 解が不安定化を起こすことがわかる. すなわち, 従来の理論の言葉では, T_G は Gardner 温度である. そして実際, 我々の命題 5.1 もまた $T = T_G$ において条件 $\phi'(n_m) = 0$ が満たされなくなる上に, 仮に $F = \phi_{RS}(n_m)$ だとしても, この解は AT 不安定であるため, 使えないことがわかる. よって我々の構成によって正しい解を導くことができないときには, AT 安定性の破れが先立つことによって命題 5.1 を用いることができなくなるという構図をしている.

以上をまとめると, RS 解の単調性の破れから 1RSB 解が現れ, かつ $n = 0$ において 1RSB 解が正しいときは n が有限のところ RS 解の単調性が破れている, ということがわかったことになる. ただし後者は, 我々の仮定「RS は AT 安定性と熱力学制約のみによって破られる」をおいた元で導かれることに注意したい. AT 安定性でも単調性でもない何らかの破れがあって, それがここで考察した条件たちよりも強くなることは十分考えられるからだ. 実際磁場中 SG 模型においては, AT 安定性でも単調性でもない

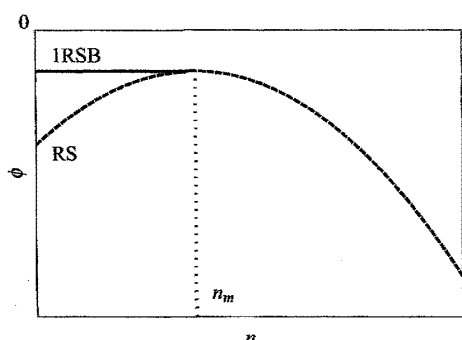


図 9: 1RSB 解の熱力学的構成の模式図. 長破線が RS 解を表し, 実線が 1RSB 解を表す.

第三の破れが存在する可能性がある. 例えば 1RSB 仮定のもと計算した q_0 は磁場中では有限の値をとることが知られているため, 熱力学的構成によっては真の解を導出できないことがわかる. 逆に言って, この事実は単調性の破れが磁場中では起こらないことを意味するため, n_{AT} が磁場に対して不連続に変化しない限り, 第三の破れは必ず存在することがわかる. しかし, 仮に単調性の破れと 1RSB 解の出現が完全に等価でないとしても, 両者が密接に関係していることは疑いないだろう.

最後に従来法における RSB 解の構成との比較をして本節を終えたい. 従来法の RSB の欠点としてまず考えられるのは, 「なぜあの関数形なのか?」という問に答えられないということだ. 他の計算できる解をたくさん集めてきて自由エネルギーの大小を比較して生き残った, という以上でも以下でもない. また分割変数 m が秩序変数として残り, m に関する最大化をなさねばならない, というのも謎が多い手続きだった. さらに「なぜ 1RSB だけ特別なのか?」というのも不思議な点だ. 実際, Parisi の RSB では KRSB 解はみな再帰的に作られていくにもかかわらず, ある特定の段階で止めた RSB が解になる, というのは奇妙だし, 1RSB 解の構成法ばかりが様々な模型に対して機能するというのは, より奇妙であったと思う [11, 22].

しかし我々の構成法はそのいずれにも解答を出している. まず関数形については, RS 解からの接続で得られているので $n \gg 1$ の RS 解を仮定する限り疑いようがない. 我々の手法の中で分割変数に対応するのは n_m であるが, これは結果的に $\phi_{RS}(n)$ を最大化することになったただけであって, 単調性を破る点, として定義されていた. そして 1RSB 解の普遍性については, 「熱力学が背後にあるから」という, 簡潔かつ力強い根拠を提示することができる.

5.4 $P(q)$ の評価

前節で 1RSB 解の熱力学的構成を導入したが, これによって計算されたのは自由エネルギーであった. しかし, 過去に Parisi 理論が数値的に検証されたと言われたのは重なり変数の分布 $P(q)$ を正しく計算することができたからであったので, 本構成もまた, 数値的検証に耐えうる $P(q)$ の構成法を提示せねばならない. というのも, 実は $K = 2$ の時, RS 仮定の元計算した自由エネルギーは真の値からの誤差数%程度では求まっていたからである. RS と RSB をクリアに分けるのは, やはり $P(q)$ であろう.

さて, この場合もやはり, 単調性の破れに基づく一般的な構成を行うことができる. 以下では単調性の破れを用いて, l 次のモーメント $\langle q^l \rangle$ を計算する. まず一般論として, 自由エネルギーに適切な外場を入れておけば, その外場に共役な変数を微分によって計算できる. 例えば強磁性体であれば, 一様磁場をかけた Hamiltonian を計算することで磁化が計算される. しかし重なり変数の場合, どのような磁場をかければいいのかあらかじめわかっているわけではない. これは, TAP 方程式の解を求めることができなかったのと同じく, どちらを向くのがエネルギー的に安定なのかがあらかじめわかっているわけではな

い, ということの意味する. しかし, n レプリカ系を持ち出すことで, それは可能になる [23, 24]²². n レプリカ系の Hamiltonian に, $q_{\alpha\beta}^l$ を出すような摂動を入れると,

$$-\beta H' = -\beta \sum_{\alpha=1}^n H^\alpha + gN \sum_{\alpha<\beta} q_{\alpha\beta}^l \quad (5.19)$$

となる. ただし

$$q_{\alpha\beta} := \frac{1}{N} \sum_i S_i^\alpha S_i^\beta \quad (5.20)$$

である.

さて, この Hamiltonian の摂動部分は,

$$\sum_{\alpha<\beta} q_{\alpha\beta}^l = N^{-l} \sum_{\alpha<\beta} \left(\sum_i S_i^\alpha S_i^\beta \right)^l \quad (5.21)$$

$$= N^{-l} \sum_{\alpha<\beta} \sum_{i_1, \dots, i_l} S_{i_1}^\alpha S_{i_1}^\beta \cdots S_{i_l}^\alpha S_{i_l}^\beta \quad (5.22)$$

$$= \frac{1}{2N^l} \sum_{i_1, \dots, i_l} \left\{ \left(\sum_\alpha S_{i_1}^\alpha \cdots S_{i_l}^\alpha \right)^2 - n \right\} \quad (5.23)$$

$$\approx \frac{l!}{2N^l} \sum_{i_1 < \dots < i_l} \left(\sum_\alpha S_{i_1}^\alpha \cdots S_{i_l}^\alpha \right)^2 - \frac{n}{2} \quad (5.24)$$

とできるので, Hubbard-Stratonovich 変換より

$$\begin{aligned} \text{Tr exp}(-\beta H') &= \text{Tr exp} \left(-\beta \sum_\alpha H^\alpha - \frac{gNn}{2} \right) \\ &\times \int \prod_{\mu \in \mathcal{G}_l} \text{D}h_\mu \exp \left(\sqrt{\frac{gl!}{N^{l-1}}} \sum_\mu h_\mu \sum_\alpha S_{i_1}^\alpha \cdots S_{i_l}^\alpha \right) \end{aligned} \quad (5.25)$$

$$= \int \prod_{\mu \in \mathcal{G}_l} (\text{Tr exp}(-\beta H_{\text{ext}}))^n \text{D}h_\mu \quad (5.26)$$

ここに

$$-\beta H_{\text{ext}} = -\beta H + \sqrt{\frac{gl!}{N^{l-1}}} \sum_{\mu \in \mathcal{G}_l} h_\mu \prod_{i \in \mu} S_i - \frac{gN}{2}. \quad (5.27)$$

となる. すなわち q^l に共役な外場は, 全結合でランダムな l 体相互作用である.

そこで, この Hamiltonian についての分配関数や自由エネルギー, キュムラント母関数を,

$$Z_{\text{ext}} := \text{Tr exp}(-\beta H_{\text{ext}}) \quad (5.28)$$

$$F_{\text{ext}} := -\frac{1}{N\beta} \log Z_{\text{ext}} \quad (5.29)$$

$$\phi(n, g) := -\frac{1}{N\beta n} \log[Z_{\text{ext}}^n] \quad (5.30)$$

として定義しこれらの量を 5.2 節の枠組で計算する. そのことによって, モーメントもまた評価されるはずである. ただし $[\dots]$ は h_μ に関する平均も含む. また, ϕ は引数の数で区別する.

このもと, 以下が成立する.

²² 樺島先生の御教授による.

命題 5.2 (1) $n \in \mathbb{R}$ として,

$$\frac{\partial \phi}{\partial g}(n, g) = \frac{1-n}{2\beta} \frac{[\langle q^l \rangle Z_{\text{ext}}^n]}{[Z_{\text{ext}}^n]} \quad (5.31)$$

ただし

$$q := \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N S_i^1 S_i^2 \quad (5.32)$$

で, $\langle \dots \rangle$ は 2 つの実レプリカに関する Boltzmann 平均を意味する.

(2)

$$\frac{\partial F_{\text{ext}}}{\partial g} = \frac{1}{2\beta} [\langle q^l \rangle] \quad (5.33)$$

証明

(1) 基本的に部分積分によって示される.

$$\begin{aligned} [Z_{\text{ext}}^n] \frac{\partial \phi}{\partial g}(n, g) &= -\frac{1}{N\beta n} \times \frac{n}{2} \left[Z_{\text{ext}}^{n-1} \text{Tr} \exp(-\beta H_{\text{ext}}) \left(\sqrt{\frac{l!}{N^{l-1}g}} \sum_{\mu} h_{\mu} \prod_{i \in \mu} S_i - N \right) \right] \\ &= -\frac{1}{N\beta} \times \frac{1}{2} \left[Z_{\text{ext}}^{n-1} \text{Tr} \exp(-\beta H_{\text{ext}}) \frac{l!}{N^{l-1}} \sum_{\mu} \left(\prod_{i \in \mu} S_i \right)^2 \right] \\ &\quad - \frac{1}{N\beta} \times \frac{n-1}{2} \left[Z_{\text{ext}}^{n-2} \text{Tr}_{1,2} \exp(-\beta H_{\text{ext}}^1 - \beta H_{\text{ext}}^2) \frac{l!}{N^{l-1}} \sum_{\mu} \left(\prod_{i \in \mu} S_i^1 S_i^2 \right) \right] \\ &\quad + \frac{1}{2\beta} [Z_{\text{ext}}^n] \end{aligned} \quad (5.34)$$

であり,

$$\sum_{\mu} \left(\prod_{i \in \mu} S_i \right)^2 = \frac{N^l}{l!} \quad (5.36)$$

$$\sum_{\mu} \left(\prod_{i \in \mu} S_i^1 S_i^2 \right) \approx \frac{N^l}{l!} \left(\sum_{i=1}^N S_i^1 S_i^2 \right)^l \quad (5.37)$$

なので,

$$q := \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N S_i^1 S_i^2 \quad (5.38)$$

とおけば,

$$\frac{\partial \phi}{\partial g}(n, g) = \frac{1-n}{2\beta} \frac{[Z_{\text{ext}}^n \langle q^l \rangle]}{[Z_{\text{ext}}^n]} \quad (5.39)$$

とできた. (2) についても同様の解析で結果にたどり着く²³.

続いて, $\phi(n, g)$ を $n \rightarrow 0$ に接続する. 今, $\phi_{\text{RS}}(n)$ が単調性を $n = n_m$ で破っているとする. このとき $\phi_{\text{RS}}(n, g)$ もまた, $g \ll 1$ ならば単調性を破っているはずである. その点を $n = n_m(g)$ と置く. すなわち,

²³(5.39) 式で形式的に $n \rightarrow 0$ と取ることで (2) の結果が見えるが, $n \rightarrow 0$ の極限の問題を議論しているのでこのような導出はしないほうがよいと思い, 二度手間を取った.

この $n_m(g)$ は g が有限の RS 解から定義される, 単調性の破れの点である. $\phi(n, g)$ に関する熱力学的構成と命題 5.2 より

$$[\langle q^l \rangle] = 2\beta \left. \frac{\partial F}{\partial g} \right|_{g=0} \quad (\text{命題 5.2(2)}) \quad (5.40)$$

$$= 2\beta \left. \frac{\partial \lim_{n \rightarrow 0} \phi(n, g)}{\partial g} \right|_{g=0} \quad (\text{レプリカ法の恒等式}) \quad (5.41)$$

$$= 2\beta \left. \frac{\partial \phi(n_m(g), g)}{\partial g} \right|_{g=0} \quad (\text{命題 5.1}) \quad (5.42)$$

$$= 2\beta \frac{d\phi(n_m)}{dn} \frac{dn_m(g)}{dg} + (1 - n_m) \frac{[Z^{n_m} \langle q^l \rangle]}{[Z^{n_m}]} \quad (\text{命題 5.2(1)}) \quad (5.43)$$

$$= (1 - n_m) \frac{[Z^{n_m} \langle q^l \rangle]}{[Z^{n_m}]} \quad (n_m \text{ の定義から } \frac{d\phi(n_m)}{dn} = 0) \quad (5.44)$$

とできた. ここまでは特殊な仮定を用いていないことを付記しておく.

次に, $\frac{[Z^{n_m} \langle q^l \rangle]}{[Z^{n_m}]}$ を RS 仮定を用いて評価すると²⁴, Hamiltonian の一体化を行うとわかるように, RS 仮定の元では q^l の平均は因子化され,

$$\frac{[Z^{n_m} \langle q^l \rangle]}{[Z^{n_m}]} = \left\{ \frac{[Z^{n_m} \langle q \rangle]}{[Z^{n_m}]} \right\}^l \quad (5.45)$$

となってしまう. よって $P(q)$ はモーメントの比較から

$$P(q) = n_m \delta(q) + (1 - n_m) \delta \left(q - \frac{[Z^{n_m} \langle q \rangle]}{[Z^{n_m}]} \right) \quad (5.46)$$

と表され, まさに 1RSB の $P(q)$ を対応

- $m \Leftrightarrow n_m$
- $q_{\text{EA}} \Leftrightarrow \frac{[Z^{n_m} \langle q \rangle]}{[Z^{n_m}]}$

によって完全に再現する. 分割変数の対応は自由エネルギーの形式的対応からも得られた関係であったが, EA 秩序変数はこの解析をすることによって初めて得られたものである²⁵. このように, 任意の Hamiltonian に対して, 単調性の破れを仮定することで, $P(q)$ を導出することができた.

ここで再び従来の理論との比較を行う. まず従来のレプリカ理論の問題点として, 平均場理論における変分パラメータとしての秩序変数は $\frac{n(n-1)}{2}$ 個ある, という点が挙げられる. すなわち, 極限 $n \rightarrow 0$ によって個数が負の値や小数をとりながら, 0 に向かっている. これは明らかに変分問題として定義されていない. そこで実際は, RS や RSB などの何らかの仮定をおくことで個数のまま残すのを回避し, 「定義の接続」を行ってから変分をしているわけだが, これは少し考えると, 大きな問題を含んでいることがわかる. 確かに通常の平均場理論でも, 仮定を置かなければ解析的に計算できないという技術的な問題はあ. しかしレプリカ理論においては, 仮定を置かなければ問題が**定義されない**のである. これは明らか

²⁴ $\phi(n, g) = \phi_{\text{RS}}(n, g)$ for $n \gg 1, g \ll 1$ を仮定して計算することになるので, 我々のおいた仮定を少し拡大解釈して用いることになる.

²⁵ 本筋からは外れるが, q_{EA} という自己相関関数の二段緩和におけるプラトーでの値や, m という揺動散逸比を, ボルツマン重みをつけた熱平均 (F) とランダム平均 (ϕ) の 2 つのタイムスケールでの平衡解析によって導出できる, というのは, 非常に示唆的な事実と思われる. もちろん SG 模型では遅いタイムスケールを手で仕込んでいるため, ガラス系におけるもっとも興味深い特徴のひとつである「長いタイムスケールの生成」という部分に関する考察を始めから捨ててしまっている. しかしそれでもなお, このように一般的な解析で q_{EA} や m が導けるという事実からは, 平衡 \times 平衡 = 非平衡, が成り立つような問題も多々あるのではないかと, 思うてしまう.

に理論の欠陥であって、その影響は例えば変分自由エネルギーを最大化しなくてはならないことにも現れている²⁶。問題が定義されていないということはすなわち、ある鞍点を選択して平均場による計算を行うというより、接続ができて計算のできる鞍点しか選びようがない、という問題設定になってしまっている、と言い換えることができる。もちろん、「計算できない鞍点は選べない」という制約そのものが何らかの物理的な真実を反映している可能性は大いにあるので²⁷、研究すべき対象であるだろう。しかしそうは言っても、何がしかの答えが得られればよいのだ、という態度は、物理としては必要であると思うが、それで十分ではないことは明らかだ。よりよい理解のためには明確に定義された概念、模型、手法のもと議論を進めるべきであろう。

一方、今回我々が提案している手法においては、変分計算をしているのは $\phi(n, g)$ ($n \in \mathbb{N}$) のみであって、ここでの変分はいつでもチェック可能である。例えば RS 仮定が成り立っているのかどうか確かめたいければ、実際に $\frac{n(n-1)}{2} \in \mathbb{N}$ 個の変数に関する極値操作を行えばよい。もちろん、しかる後に $n \in \mathbb{R}$ へと接続しているのでここには問題がある。とは言え整数上での値から実関数への接続、というのはレプリカ法で問題を解く限り避けては通れない道であり、その接続なしにいきなり $\phi(n, g)$ が得られるような問題であれば、そもそもの始めに戻って $[\log Z]$ が計算可能であるから、レプリカ法など必要ない。よって整数から実数への拡張はレプリカ法における最小限の仮定であり、そこに諸悪の根源を押し付けてあとは可能な限り理詰めで押し切る、というのは意味のあるアプローチであると思われる。またこれによって、何か問題があればそれは ϕ の接続が悪かった、と背理法的に帰結されるため、論理の検証も容易である。

もちろん、現段階で Parisi 理論のすべてがこのプログラムによって再現されているわけではない。実際、もっとも標準的な平均場模型である 2 体の SK 模型の解は FRSB で記述されるが、FRSB 解の構成はいまだ夢想すらできない状態である。しかし SK 模型においては $\phi(n)$ の接続と $q(x)$ の関数形が密接に関連していた [20, 21]、という事実は我々の取り組みにとってよい材料であると思う。

6 疎結合スピングラス模型の解析

疎結合スピングラス模型の解析は、計算科学における計算の困難さという問題 (K -SAT) と密接に関係した問題群である。LDPC 符号や有歪圧縮法の開発、また survey propagation に代表される heuristic algorithm の開発も主にこの疎結合模型で行われており、従来の統計力学と新しい情報科学とが出会う場を提供している。その意味で、疎結合スピングラス模型は情報統計力学の基本問題、と位置づけてもよいだろう。

しかし疎結合スピングラス模型の解析は一般に、全結合型模型と異なり複雑な一体問題化の手続きを要する。さらに秩序変数として多体のレプリカ相互作用を含むことになるため、素朴な RSB の導入は平均場や常磁性相からの摂動領域を除き行うことはできない。

このような困難かつ重要な問題に対して、第 5 章で導入した熱力学的構成を用いて 1RSB 解を解析的に書き下す。また Monte Carlo (MC) 計算との整合性を確認する。

6.1 疎結合 $\pm J$ 模型

以下で扱う K 体相互作用、結合数 C の疎結合 SG 模型を定義する。

$$H = - \sum_{\mu \in \mathcal{G}_K} J_\mu D_\mu \prod_{i \in \mu} S_i \quad (6.1)$$

²⁶ 自由エネルギー最大化をきちんと定式化した Guerra の不等式 [25] は、変分不等式を初めて数学的に示した、という意味で非常に価値のある研究であると思う。

²⁷ 超計量性などはこのような性質であろう。

ここに, $S_i = \pm 1$ なる力学変数²⁸ である. また $J_\mu = \pm 1, D_\mu = 0, 1$ はランダムネスに対応し,

$$\Pr(J_\mu = \pm 1) = \frac{1}{2} \quad (6.2)$$

$$\Pr(\{D_\mu\}) = \text{const. if } \sum_{\mu \in \mathcal{G}_K, i \in \mu} D_\mu = C \text{ for } \forall i. \quad (6.3)$$

とおく. すなわち, 結合の強さは ± 1 を確率 $1/2$ でとり, 格子は結合数一定のレギュラーランダムグラフにとる. これは, K 体 SK 模型のボンドをランダムに抜いたような模型になっている. そのように解釈すれば, 距離の概念がない, という全結合模型の平均場的性質を残しつつ, 結合数を有限の値 C にしていることになる.

6.2 レプリカ解析

この模型に対してレプリカ解析を行う. やはりキュムラント母関数を

$$\phi(n) := -\frac{1}{N\beta n} \log[Z^n] \quad (6.4)$$

とおく. ただし, $[\dots]$ は J と D に関する平均を意味する. さて, この模型のレプリカ解析は非常に複雑であるため詳細は付録 A.1 にまとめてあるが, そのうちから, 部分的に抜き出し議論する.

まず, 一体化を済ませたレプリカ解析の結果として,

$$\begin{aligned} [Z^n] = & \frac{1}{N_D} \text{Tr} \oint dz \int \prod_l \prod_{\alpha_1 < \dots < \alpha_l} \frac{dq_{\alpha_1 \dots \alpha_l} d\hat{q}_{\alpha_1 \dots \alpha_l}}{2\pi i} \\ & \exp \left\{ \cosh^n \beta \sum_l \sum_{\alpha_1 < \dots < \alpha_l} [\tanh^l \beta J_\mu] \frac{(N q_{\alpha_1 \dots \alpha_l})^K}{K!} \right. \\ & \left. + \sum_l \sum_{\alpha_1 < \dots < \alpha_l} \hat{q}_{\alpha_1 \dots \alpha_l} \left(\sum_{i=1}^N z_i S_i^{\alpha_1} \dots S_i^{\alpha_l} - N q_{\alpha_1 \dots \alpha_l} \right) \right\} \end{aligned} \quad (6.5)$$

が得られる. この式における全結合の場合との差異は, 複数レプリカ間の重なり変数が, 定義

$$q_{\alpha_1 \dots \alpha_l} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N z_i S_i^{\alpha_1} \dots S_i^{\alpha_l} \quad (6.6)$$

によって出てくることだろう. よって Parisi 理論が正しいと信じたとしても, それをどのように適用するのかはまったく自明ではない. しかし, ここに RS 仮定

$$q_{\alpha_1 \dots \alpha_l} = q_l \quad (6.7)$$

を課すことはできる²⁹. その結果, RS 仮定の下でのキュムラント母関数

$$\phi(n) = -\frac{C}{K\beta} \log \cosh \beta - \frac{1}{\beta n} \text{extr}_{\pi, \hat{\pi}} \left\{ \frac{C}{K} \log I_1 - C \log I_2 + \log I_3 \right\} \quad (6.8)$$

を得る. I_i などの定義は付録 A.1 を参照していただきたい. RS 解さえあれば, 熱力学的構成によって 1RSB 解を構成することができるのでそれを実行する. 式の上では $\phi_{\text{RS}}(n)$ を最大化する点を n_m とおき, $F_{1\text{RSB}} = \phi_{\text{RS}}(n_m)$ と等置すればよい. 一方, 通常の RS 解も比較のため $F_{\text{RS}} = \phi_{\text{RS}}(0)$ として定義する. また, 重なり変数については

$$P(q) = n_m \delta(q) + (1 - n_m) \delta(q - q_{\text{EA}}) \quad (6.9)$$

²⁸熱ゆらぎに関与する変数.

²⁹多様なものを一様にするのは容易であるが, その逆は難しい.

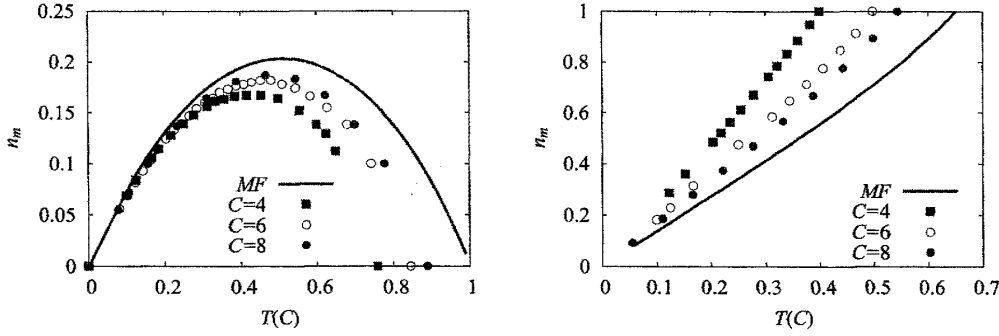


図 10: n_m の温度依存性. 温度は, $C \rightarrow \infty$ において全結合模型のスケールに一致するように $\sqrt{K/2CT}$ としてプロットした. $K = 2$ (左図) と $K = 3$ (右図). 点は結合数 C が有限の数値計算の結果で, 実線は全結合模型の結果を表す.

となる. ここに, q_{EA} は

$$q_{EA} = \frac{[Z^{n_m} \langle q \rangle]}{[Z^{n_m}]} \quad (6.10)$$

によって定める.

以上はすべて 5 章の一般論の枠内で議論できるため詳細は省いた. 付録 A.2 に従って, $K = 2, 3, C = 4$ の場合について, $0.2T_c < T$ までの解析を行った. 図 10 は, n_m の温度依存性を示したグラフである. これは全結合のときと同様に, $K = 2$ では $T = T_c$ で $n_m = 0$ だが, $K = 3$ では $T = T_c$ で $n_m = 1$ となっている.

ところがこの模型の場合, 通常の方法で AT 安定性解析を行うことができない. すなわち 5 章において AT 安定性と単調性の競合によって $n = 0$ の極限が決定される, という部分を扱うことができないため, 「本当に 1RSB 解でいいのか?」という部分の検証を理論の中で行うことができない. そこで以下の節では, 我々の結果を Monte Carlo 計算によって検証する.

6.3 Monte Carlo 計算による検証

本節では, 我々の結果を検証するために Monte Carlo(MC) 計算によって疎結合 SG 模型を直接数値計算し, 比較する.

6.3.1 アルゴリズム

本研究では, 緩和を加速するために交換 MC 法 [26] を用いた. 交換 MC 法とは, ある温度のボルツマン分布を $p(\mathbf{S}|\beta)$ とおいたとき,

$$P(\mathbf{S}^1, \dots, \mathbf{S}^M) = \prod_{i=1}^M p(\mathbf{S}^i|\beta_i) \quad (6.11)$$

からのサンプリングを行うものである. 具体的な手続きは付録 A.3 にある. このように分布 p を一種の余剰次元の方向に拡大して混合を促進し, サンプリングを容易にする手法を拡張アンサンブル法という [27].

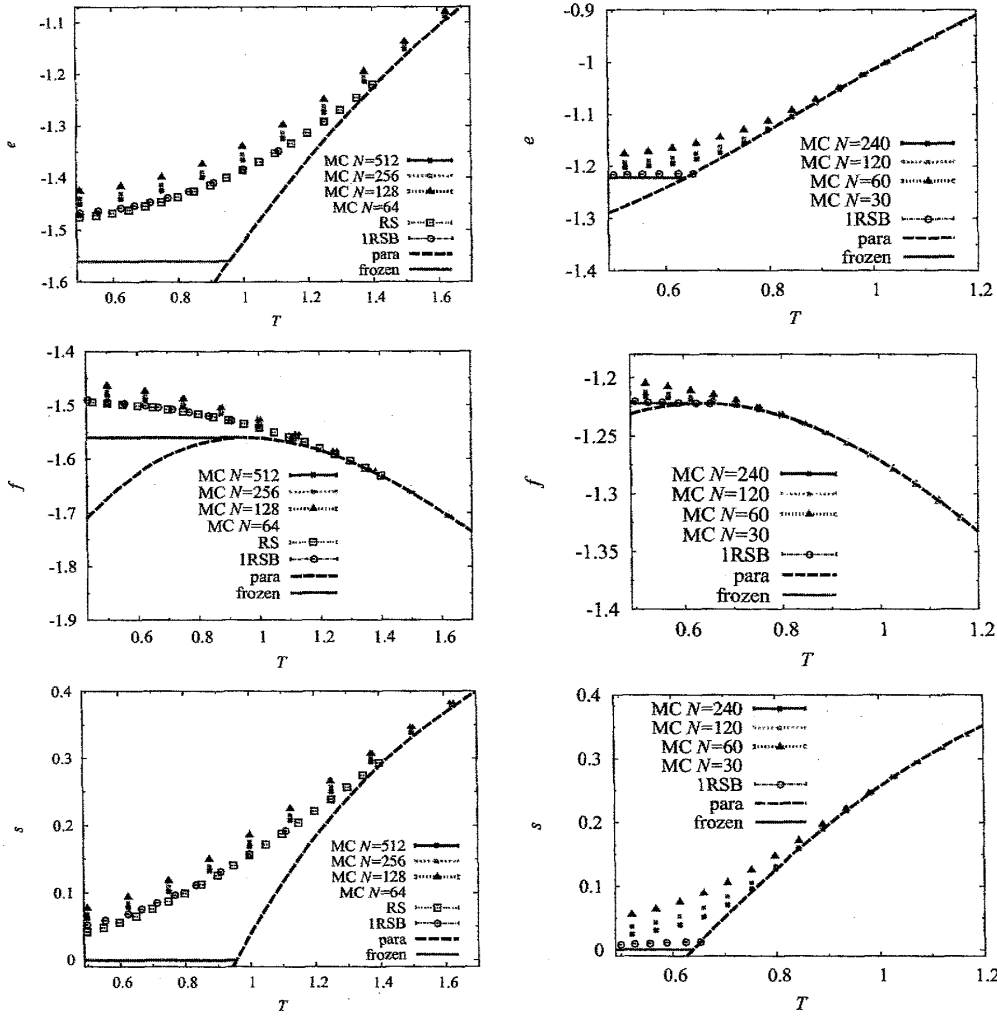


図 11: 熱力学量の温度依存性. 上段からエネルギー, 自由エネルギー, エントロピー. 左列は $K = 2$, 右列は $K = 3$. 塗りつぶした印はそれぞれのサイズでの MC の結果を, 中抜き丸は 1RSB 解を, 中抜き四角は RS 解を表す. 実線は frozen ansatz (本文参照) から得られた解であり, 点線は常磁性解である.

6.3.2 熱力学量

まずエネルギー, 自由エネルギー, エントロピーの熱力学量について検証した. この節では, $(K, C) = (2, 4)$ および $(3, 4)$ を対象とし, 以下では K の値でそれらを指示している.

サイズ N での 1 サイトあたりの量をそれぞれ e_N, f_N, s_N とおく. それぞれ数値実験の結果と解析計算の結果を合わせて示したものが図 11 である. いずれの場合も 1RSB 解は定性的に正しい解を与えていることがわかる. $K = 3$ の場合 RS 解が存在しないのは, 我々の方法によっては常磁性解以外の解を発見することができなかったからである. このように, $n \rightarrow 0$ 極限での RS 解が構成できないような問題に対しても, 我々の手法は機能することがわかる. また, 常磁性解のみを用いて低温の熱力学量を計算する手法として frozen ansatz というものがある. それは, 常磁性解のエントロピーが 0 になる温度 $s(T_g) = 0$ を定め, $T < T_g$ では $e(T) = f(T) = \text{const.}$ を仮定するものである. この仮定に基づいた解は, 特に $K = 2$ の時は我々の解および MC の結果と乖離している.

次に, より定量的な比較をするため, 数値結果の熱力学極限への外挿を試みた. SG 模型においては有限

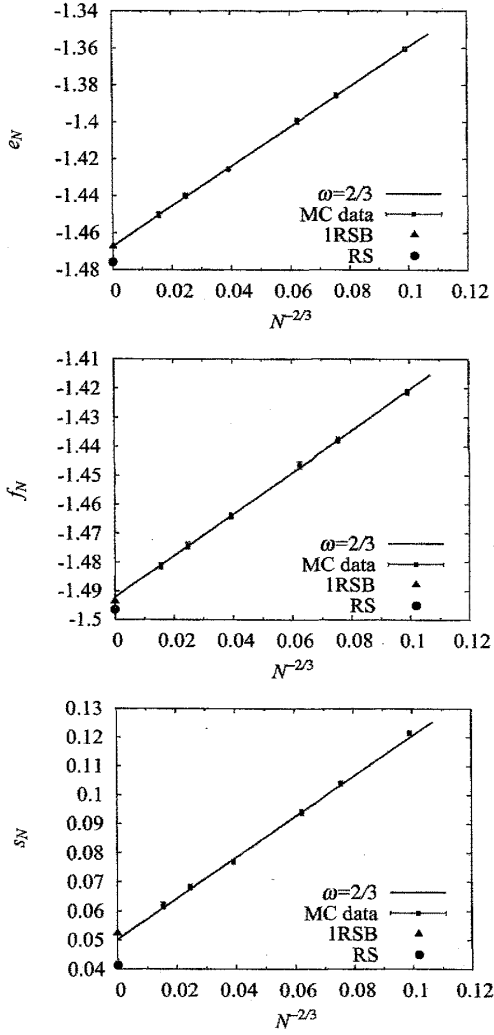


図 12: $K = 2$, $T = 0.5$ における熱力学量のサイズ依存性. 上から順にエネルギー, 自由エネルギー, エントロピー. $N^{-2/3} > 0$ の点は各サイズでの MC の結果で, $N^{-2/3} = 0$ の点は三角が 1RSB 解で, 丸が RS 解である. 実線は $\omega = 2/3$ を仮定した最小二乗フィッティングの結果を表している.

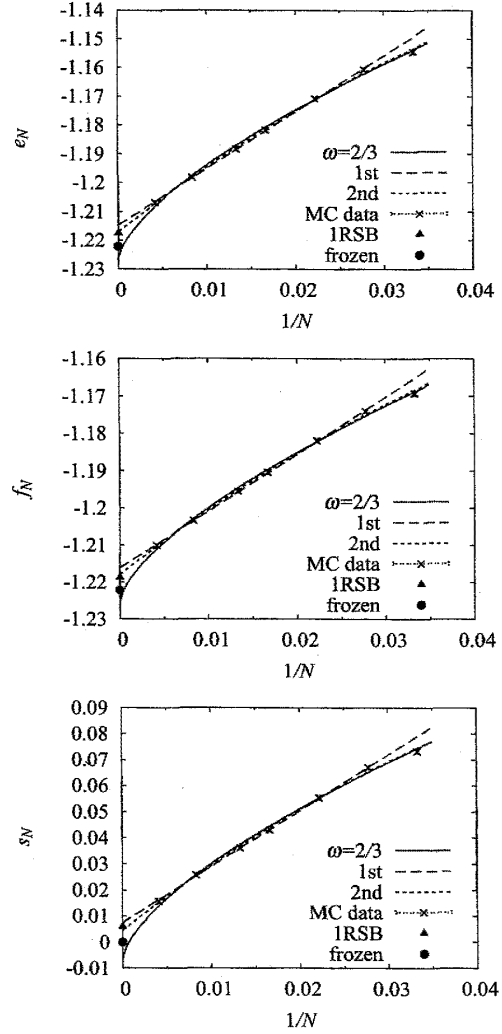


図 13: $K = 3$, $T = 0.2$ における熱力学量のサイズ依存性. 実線は $\omega = 2/3$ を, 長破線は $\omega = 1$ を, 短破線は $\omega = 1$ と N^{-2} の補正を, それぞれ仮定して外挿したもの. 丸い点は frozen ansatz によって評価した値. 他の詳細は図 12 と同様.

サイズ補正が非自明になるため, 外挿そのものが研究の対象でもある. まず, 有限サイズ補正の主要項を

$$e_N = e_\infty + a_e N^{-\omega}, \quad (6.12)$$

$$f_N = f_\infty + a_f N^{-\omega}, \quad (6.13)$$

$$s_N = s_\infty + a_s N^{-\omega}, \quad (6.14)$$

とおく. ω は一つの模型の中の全ての熱力学量で共通であると仮定したが, K の値によって変わりうることに注意する. $K = 2, T = 0$ においては, Boettcher による基底状態探索によって, $\omega = 2/3$ であることがわかっているため [28], いったんこれを仮定する.

外挿の結果を示したものが図 12, 13 である. 前者が $K = 2$ の場合で, 後者が $K = 3$ の場合である. $K = 2$ のときは $\omega = 2/3$ によって適切にスケールされ, さらに熱力学極限において我々の 1RSB 解と一

	$N = 30$ を含む外挿	$N = 30$ を含まない外挿
$T = 0.5$	0.74(8)	0.86(1)
$T = 0.2$	0.80(8)	0.92(1)

表 1: ω の推定値. 行は温度依存性を, 列は最小サイズ $N = 30$ のデータを含むか含まないかをそれぞれ表す.

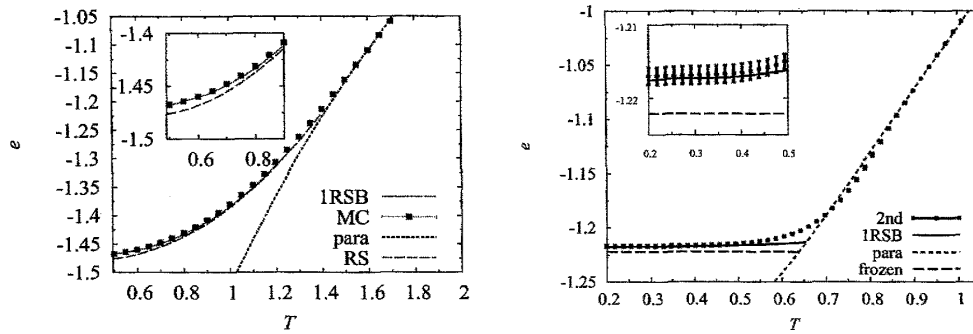


図 14: 外挿値の温度依存性. $K = 2$ (左図) と $K = 3$ (右図). $K = 2$ では $\omega = 2/3$, $K = 3$ では $1/N$ の二次多項式で外挿したもの. 実線は 1RSB 解を, 短破線は常磁性解を表す. 長破線は, $K = 2$ のときは RS 解を, $K = 3$ のときは frozen ansatz を表す.

致していることがわかる.

しかし $K = 3$ のときは $\omega = 2/3$ では正しくスケールされなかった. 実際, ω もフィッティングパラメータに加えた最小二乗法による ω の推定値が表 1 である. $T_c \approx 0.65$ であるので $T = 0.5$ の推定値は臨界ゆらぎに影響されている可能性が高いため, $T = 0.2$ の方が信頼性があることを考えると, $\omega = 2/3$ ではなく, $\omega \approx 1$ と結論してよいだろう. そこで $\omega = 1$ であると仮定する. また $N = 30$ は最小のサンプルなのだが, これを含めて推定したときの標準誤差とこれを除いて推定したものの標準誤差は約 8 倍違った. これは, 有限サイズ補正の二次以降の項が影響していることを示唆している. そこで $K = 3$ については, 外挿公式

$$e_N = e_\infty + a_1 N^{-1} + a_2 N^{-2} \quad (6.15)$$

$$f_N = e_\infty + b_1 N^{-1} + b_2 N^{-2} \quad (6.16)$$

$$s_N = e_\infty + c_1 N^{-1} + c_2 N^{-2} \quad (6.17)$$

を仮定した. この外挿公式の熱力学極限は, 我々の 1RSB 解と一致していることがわかる.

最後に, エネルギーの外挿値の温度依存性を示したものが図 14 である. 広い温度領域において我々の 1RSB 解は数値計算の外挿値と一致していることが見て取れる.

6.3.3 重なり変数

次に, 重なり変数の結果を示す. ここでは $(K, C) = (2, 4)$ および $(3, 6)$ の場合を対象とする. 以下では K の値でそれらを指示している.

重なり変数の分布

MC 測定によって得られたヒストグラムを規格化したものが図 15 である. これから, $K = 2$ のときは FRSB 的, $K = 3$ のときは 1RSB 的であることが示唆される.

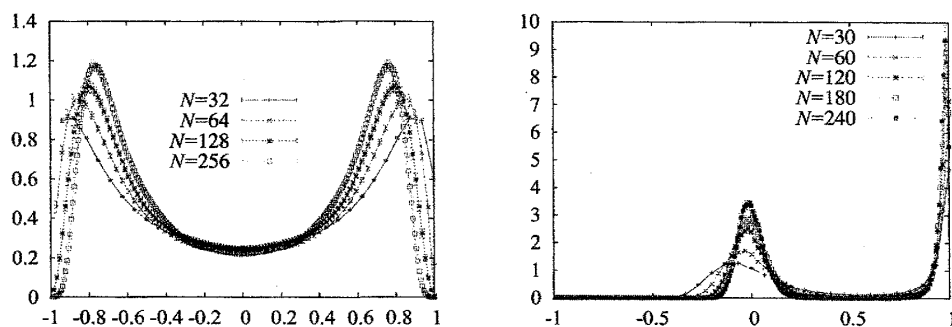


図 15: 重なり変数の分布 $P(q)$ の測定結果. $K = 2, T/T_c = 0.5$ (左図) および $K = 3, T/T_c = 0.6$ (右図). 各点はサイズの違いを表す.

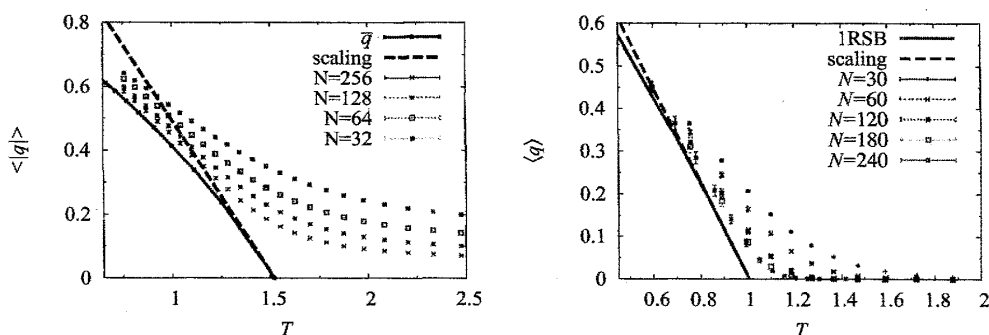


図 16: 重なり変数の平均値. $K = 2$ (左図) と $K = 3$ (右図). 各点はサイズの違いを表し, 実線は 1RSB 解である. 点線は, 有限サイズスケーリングによる $T = T_c$ での傾きの数値的評価である.

重なり変数の平均値

解析解は,

$$\langle q \rangle = (1 - n_m) q_{EA} \quad (6.18)$$

によって決定されている. これを MC の結果と合わせて示したものが図 16 である.

$K = 2, 3$ とともに, 十分低温では定量的によく記述できているのがわかる. また数値データの有限サイズスケーリングによる解析から $T \lesssim T_c$ における傾きを評価したところ, 図に示したように, 我々の解析解はこの振舞を非常によく記述できていることがわかった. よって解析解は, $T \lesssim T_c$ においても定量的により評価を与えていると言える.

分割変数

解析解は, n_m そのものである. これを MC の結果から,

$$m = 1 - \frac{\langle |q| \rangle^2}{\langle q^2 \rangle} \quad (K = 2) \quad (6.19)$$

$$m = 1 - \frac{\langle q \rangle^2}{\langle q^2 \rangle} \quad (K = 3) \quad (6.20)$$

によって推定したものと合わせて示したものが図 17 である. やはり $K = 3$ のときは定性的には記述できていることが確認された. しかし $K = 2$ のときは定性的にすら合わないことがわかる. 特に $T \sim T_c$ においてサイズ依存性を失っている点の m の値が, 0 から有意に離れている. これから, 熱力学極限においても解析解に一致しないことが期待される. この事実は, $P(q)$ の概形からも推測されたことである.

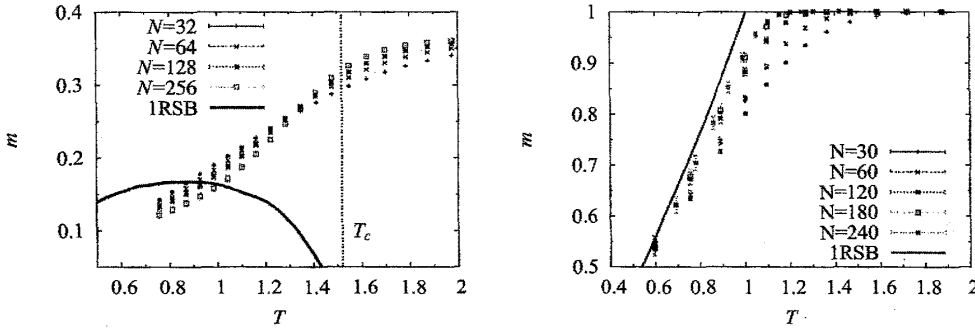


図 17: 分割変数. $K = 2$ (左図) と $K = 3$ (右図). 各点はサイズの違いを表し, 実線は 1RSB 解である.

Binder 比

Binder 比

$$g = \frac{1}{2} \left(3 - \frac{\langle q^4 \rangle}{\langle q^2 \rangle^2} \right) \quad (6.21)$$

の測定結果が図 18 である. $K = 2$ のときは様々なサイズでのデータが交点を持つ一方, $K = 3$ では $T \gtrsim T_c$ において, サイズを上げるほどに谷が成長しているのが見て取れる. $P(q)$ が 1RSB かつ $m(T_c - 0) = 1$ を仮定すると $g(T_c) = -\infty$ が示されるので, 負に発散をしていくのが 1RSB の特徴である. さらに EA 秩序変数 q_{EA} が $T = T_c$ において不連続に立ち上がるとき, $1 - m = P(q_{EA}) \leq O(|T - T_c|^1)$ である. なぜならば, $\langle q \rangle > P(q_{EA})q_{EA}$ であり, $\langle q \rangle$ は $T \lesssim T_c$ で $O(|T - T_c|^1)$ のように振舞うことが期待されるからである. よってこのとき, $m(T_c - 0) = 1$ となるため, 上での議論により Binder 比は発散する. また逆に, $P(q)$ の定義域が連続的に広がる場合, $q_{EA} = \epsilon$ と書くと, 規格化から分布関数は ϵ について

$$\tilde{P}(q) = \epsilon^{-1} P(\epsilon q) \quad (6.22)$$

とスケールされるので,

$$\frac{\langle q^4 \rangle}{\langle q^2 \rangle^2} = \frac{\int q^4 P(q) dq}{\left(\int q^2 P(q) dq \right)^2} = \frac{\int r^4 \tilde{P}(r) dr}{\left(\int r^2 \tilde{P}(r) dr \right)^2} \quad (r = \epsilon^{-1} q) \quad (6.23)$$

となる. よって Binder 比は q_{EA} が連続に立ち上がるとき, 発散することはない. よって Binder 比の発散は, より一般には q_{EA} の不連続転移と対応している, と言える³⁰.

6.4 考察

これらの数値計算の結果をまとめたものが表 2 である. まずエネルギーや自由エネルギーなどの熱力学量については, この数値計算の誤差の範囲内では我々の 1RSB 解で十分に記述できていることがわかった. 1RSB 解は RS 解や frozen ansatz による解よりも真の解に近く, 従来法を改善する一般的手法でもあることが明らかになった. よってこの意味において, 我々の手法は RSB を伴う平均の評価をせねばならない現実の問題群に対する, 一つの一般的な処方箋を与えることに成功した, と言っていいだろう.

次に, 重なり変数 q について考察する. その分布 $P(q)$ は $K = 2$ のとき FRSB 的, $K = 3$ のとき 1RSB 的であることがわかった. これは全結合模型における状況と同じであり, 非常に自然な帰結である. また, より定量的な議論をするためにモーメントを見ると, 一次の量 $\langle q \rangle$ は $K = 2$ の場合, 1RSB 解によってよく記述されていた. しかしより高次のモーメント量が 1RSB 解と一致しないこともわかったので,

³⁰1RSB であるが Binder 比の発散しない模型として全結合 3 状態 Potts glass が挙げられるが, この模型では確かに q_{EA} は連続的に立ち上がる [29].

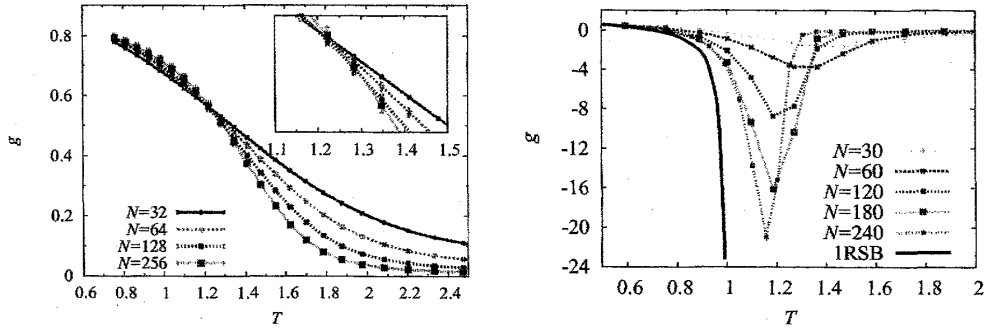


図 18: Binder 比. $K = 2$ (左図) と $K = 3$ (右図). 各点はサイズの違いを表す. $K = 3$ のグラフの実線は解析解を表す.

	$K = 2$	$K = 3$
熱力学量	○	○
$\langle q \rangle$	○	○
分割変数	×	○
Binder 比	× (交点を持つ)	谷を形成
$P(q)$	× (連続的)	二値的

表 2: 数値計算と解析計算の一致を比較した表. 解析解で記述できた部分 (○), できなかった部分 (×), 数値計算が不十分ではあるが定性的には記述できた部分 (△) の印をつけてある.

$K = 2$ のときは 1RSB では不十分であり, より高階の RSB が必要であることがわかった. これらの事実は, $K = 2$ の系が FRSB であることを示唆する.

一方 $K = 3$ のときは, q や分割変数 m などの比較によって, 我々の解は現象を定量的に記述できていることが分かった. この事実から, 我々の $K = 3$ での解は数値的に検証されたといいだろう.

7 まとめ

本修士論文では, スピングラス模型におけるレプリカ法を熱力学的見地から見た一般的な考察を行い, 1RSB 解の構成法を模型ごとの個性によらずに提供することができた. キュムラント母関数の特異性は, 多くの模型では「単調性の破れ」もしくは「AT 安定性の破れ」によって, 特徴付けられることがわかった. 特に単調性の破れは 1RSB の出現と密接に関係していて, 外場のない状況など適切な仮定のもとでは, 両者は等価であることがわかった. これは Parisi 理論において 1RSB が様々な模型において普遍的に現れることに対する一つの簡潔な説明となっている.

また自由エネルギーの従来の構成法との対応から, 単調性の破れの点 n_m は, 分割変数 m と等価であることがわかった. これは, さまざまな場面で顔を出す分割変数の一般的構成法として機能するはずである.

さらに, 重なり変数の分布に関する解析から, 1RSB の $P(q)$ を導出することに成功した. また Edwards-Anderson 秩序変数 q_{EA} は, 有限レプリカ数での平均値 $\frac{[Z^{n_m} \langle q \rangle]}{[Z^{n_m}]}$ によって決定されることもわかった. 従来の理論では重なり変数は $n \rightarrow 0$ となる枚数のレプリカ間の重なりとして定義されていたが, 本解析では実レプリカに関する平均となるため数値的な測定で測る量とまったく同じ定義のものを直接評価している. 実レプリカ間の重なり変数は定義も明確であるため, 確実な土台の上に今後議論を行うことができるはずである.

疎結合 SG 模型に対して, 我々が提案した 1RSB 解の熱力学的構成を適用した. さらにこの計算が与える解を検証するため, MC 計算も行った. 相互作用数 $K = 2, 3$ とも, 熱力学量や重なり変数の平均値は

我々の解によってよく記述されていたが、 $K = 2$ における重なり変数の高次のモーメントは1RSB 仮定のもと評価したものと定性的に異なっていた。これは $K = 2$ の模型が、全結合のときと同様FRSB を示していることを示唆している。一方 $K = 3$ のときは Binder 比などの定性的な振る舞いや $\langle q \rangle$, m の定量的な比較から、解は1RSB であり、それが我々の解と整合していることが分かった。よって我々の解析解は $K = 3$ の場合の正しい解になっている、ということが数値的な証拠から結論される。

今後の課題としては、 $K = 3$ のとき数値計算によって検証された我々の解が正しいことを、解析的な手法によって示すことである。そのためにはまず、AT 不安定性の解析を実行することで1RSB/FRSB の明確な区分を行うことが必要であろう。

最後に、今後の展望を述べて本修士論文を終えたい。第1章にも書いたようにスピングラス理論は、ガラス系や情報理論などへの昨今の統計力学的アプローチの原型となっていて、今日的にもなお重要さを増している。しかしその一方で、手法の総体としての統計力学の側面が重視され過ぎると、統計力学的な手法を様々な研究分野に導入し解析するだけに留まってしまう、という危険性もある。そこで、むしろ従来の物理学のように、そういった現象群に共通の特徴「固まること」とはどういうことなのか、という普遍的な問題設定に対する具体例として個々の問題を見ていく、という発想が今後より重要になっていくものと考えられる。そのためにも、あまり模型に依存しない性質を具体的な問題たちから抽出し、それらによって固まることへのより広く深い理解を得ることこそが、これからのスピングラス理論に求められることであろう。自らがこのような方向性の研究をより押し進めていけるように願いながら、筆を置く。

A 疎結合スピングラス模型の解析の詳細

A.1 レプリカ解析

$$H = - \sum_{\mu \in \mathcal{G}_K} J_\mu \mathcal{D}_\mu \prod_{i \in \mu} S_i \quad (\text{A.1})$$

ここに、 $S_i = \pm 1$ なる力学変数³¹である。また $J_\mu = \pm 1, \mathcal{D}_\mu = 0, 1$ はランダムネスに対応し、

$$\Pr(J_\mu = \pm 1) = \frac{1}{2} \quad (\text{A.2})$$

$$\Pr(\{\mathcal{D}_\mu\}) = \text{const. if } \sum_{\mu \in \mathcal{G}_K, i \in \mu} \mathcal{D}_\mu = C \text{ for } \forall i. \quad (\text{A.3})$$

とおく。分配関数を $Z = \text{Tr} \exp(-\beta H)$ により定義し、 $[Z^n]_{J,D}$ を評価したい。ここにランダム平均記号の下付き添え字は、その文字について平均を取ることを意味し、何も書かないときは J, D 両方について平均を取ることを意味する³²。 $M = \frac{NC}{K}$ として、

$$[Z^n] = \frac{1}{2^M} \sum_{J_\mu = \pm 1} \frac{1}{\mathcal{N}_D} \sum_{\mathcal{D}_\mu = 0, 1, \sum_{i \in \mu} \mathcal{D}_\mu = C} Z^n \quad (\text{A.4})$$

ここに \mathcal{N}_D は D の和に関する規格化定数である。いま、和の範囲を $\mathcal{D}_\mu = 0, 1, 2, 3, \dots$ と拡大したとする。このとき、このレプリカ分配関数から計算される物理量がサイズ依存性について $O(N)$ の変化³³を持つことはない。なぜならば、この拡張によって問題が起こりうるのは一つのボンドが二重、三重にカウントされてしまうことであるが、実はランダムグラフが C の数倍程度の数の二重以上のボンドを持つ確率は

³¹熱ゆらぎに関与する変数

³²本節の内容は、三村和史先生のセミナーで教えていただいた内容を基礎として書かれている。

³³例えば $O(N)$ の \mathcal{D}_μ だけ2で後は1か0となるものが $O(1)$ の確率で出てしまうとすると、平均値に効いてくる。

$o(1)$ と評価されるため [30], この拡張の影響は熱力学極限では消えると考えられるからである³⁴. また, 各項を

$$[Z^n] = \frac{1}{2^M} \sum_{J_\mu=\pm 1} \frac{1}{\mathcal{N}_D} \sum_{\mathcal{D}_\mu=0,1,2,\dots,\sum_{\mu(i)} \mathcal{D}_\mu=C} Z^n \prod_{\mu} \frac{1}{\mathcal{D}_\mu!} \quad (\text{A.5})$$

のように変更する. 最後の因子は $\mathcal{D}_\mu = 0, 1$ ならば 1 なので, 同様の理由によって $o(N)$ の補正しか持たない. よって, 熱力学極限を議論する限りにおいては問題がない近似だと考えられる. 以下の解析ではこのように, ランダムグラフの状態空間を拡張して議論を進める. これに伴い, 規格化定数も変更することにする.

A.1.1 規格化定数の計算

グラフ平均についての規格化因子を求める.

$$\mathcal{N}_D = \sum_{\mathcal{D}_\mu} \prod_i \delta\left(\sum_{\mu(i)} \mathcal{D}_\mu, C\right) \prod_{\mu} \frac{1}{\mathcal{D}_\mu!} \quad (\text{全てのサイトから出ているボンドが } C \text{ 本のグラフがあったら} +1) \quad (\text{A.6})$$

$$= \sum_{\mathcal{D}_\mu} \prod_i \oint_{|z_i|=1} \frac{dz_i}{2\pi i} z_i^{\sum_{\mu(i)} \mathcal{D}_\mu - C - 1} \prod_{\mu} \frac{1}{\mathcal{D}_\mu!} \quad (\text{Kronecher } \delta \text{ なので留数定理}) \quad (\text{A.7})$$

$$= \sum_{\mathcal{D}_\mu} \oint \left\{ \prod_i \frac{dz_i}{2\pi i z_i^{C+1}} \right\} \prod_i \prod_{\mu(i)} z_i^{\mathcal{D}_\mu} \frac{1}{\mathcal{D}_\mu!}. \quad (\text{A.8})$$

以下

$$\oint \prod_i \frac{dz_i}{2\pi i z_i^{C+1}} = \oint d_C z \quad (\text{A.9})$$

とおく. 今,

$$\prod_i \prod_{\mu(i)} = \prod_{\mu} \prod_{i(\mu)} \quad (2 \text{ 部グラフをどちらから見るか, ということによらない}) \quad (\text{A.10})$$

より,

$$\mathcal{N}_D = \sum_{\mathcal{D}_\mu} \oint d_C z \prod_{\mu} \frac{1}{\mathcal{D}_\mu!} (z_{\mu(1)} \cdots z_{\mu(K)})^{\mathcal{D}_\mu} \quad (\mathcal{D}_\mu \text{ の値があるところだけ書く}) \quad (\text{A.11})$$

$$= \oint d_C z \prod_{\mu} \left\{ \sum_{\mathcal{D}_\mu=0}^{\infty} \frac{1}{\mathcal{D}_\mu!} \left(\prod_{i=1}^K z_i \right)^{\mathcal{D}_\mu} \right\} \quad (\text{A.12})$$

$$= \oint d_C z \exp\left(\sum_{\mu} \prod_{i(\mu)} z_i\right) \quad (\text{A.13})$$

$$\approx \oint d_C z \exp\left\{ \frac{1}{K!} \left(\sum_i z_i \right)^K \right\} \quad (\text{A.14})$$

$$(\text{A.15})$$

とできる. Dirac δ とその積分表示を用いて

$$q = \frac{1}{N} \sum_i z_i \quad (\text{A.16})$$

³⁴ この事実は, 実際にランダムグラフを生成して数値的に確認してみた.

を導入すると,

$$\mathcal{N}_D = \oint d_C z \int \frac{dq d\hat{q}}{2\pi i} \exp \left\{ \hat{q} \left(\sum_i z_i - Nq \right) + \frac{(Nq)^K}{K!} \right\} \quad (\text{A.17})$$

$$= \int \frac{dq d\hat{q}}{2\pi i} \exp \left\{ -Nq\hat{q} + \frac{(Nq)^K}{K!} \right\} \times \left(\frac{\hat{q}^C}{C!} \right)^N \quad (\text{留数積分}) \quad (\text{A.18})$$

とできた. 最後に熱力学極限を取ることで,

$$\log \mathcal{N}_D = \text{extr}_{q, \hat{q}} \left\{ -Nq\hat{q} + \frac{(Nq)^K}{K!} + N \log \left(\frac{\hat{q}^C}{C!} \right) \right\} \quad (\text{A.19})$$

とできた. この右辺を q, \hat{q} で微分して得られる鞍点方程式を解くと,

$$q^K = \frac{C(K-1)!}{N^{K-1}} \quad (\text{A.20})$$

$$\hat{q}^K = \frac{(CN)^{K-1}}{(K-1)!} \quad (\text{A.21})$$

なので, 規格化因子 \mathcal{N}_D は最終的に,

$$\frac{1}{N} \log \mathcal{N}_D = \frac{C}{K} - C - \log C! - \frac{C}{K} \log(K-1)! + \frac{K-1}{K} C \log NC \quad (\text{A.22})$$

と表すことができた.

A.1.2 分配関数の平均

この計算も基本的には前節と同様である.

$$\mathcal{N}_D[Z^n]_D = \text{Tr} \sum_{\mathcal{D}} \prod_i \delta \left(\sum_{\mu(i)} \mathcal{D}_\mu, C \right) \prod_\mu \exp \left(\beta \mathcal{D}_\mu J_\mu \sum_{\alpha=1}^n \prod_{i \in \mu} S_i^\alpha \right) \quad (\text{A.23})$$

$$= \dots \quad (\text{A.24})$$

$$= \text{Tr} \oint d_C z \prod_\mu \left\{ 1 + z_{\mu(1)} \cdots z_{\mu(K)} \prod_\alpha \exp \left(\beta J_\mu \prod_{i \in \mu} S_i^\alpha \right) \right\} \quad (\text{A.25})$$

とできる. これを J について平均すると

$$\exp \left(\beta J_\mu S_{\mu(1)}^\alpha \cdots S_{\mu(K)}^\alpha \right) = \cosh \beta \left(1 + S_{\mu(1)}^\alpha \cdots S_{\mu(K)}^\alpha \tanh(\beta J_\mu) \right) \quad (\cosh \text{ は偶関数}) \quad (\text{A.26})$$

なので,

$$\left[\prod_\alpha \exp \left(\beta J_\mu \prod_{i \in \mu} S_i^\alpha \right) \right]_J = \cosh^n \beta \left[\prod_\alpha \left\{ 1 + \tanh(\beta J_\mu) \prod_{i \in \mu} S_i^\alpha \right\} \right] \quad (\text{A.27})$$

$$= \cosh^n \beta \sum_{l=0}^n \tanh^l(\beta J_\mu) \sum_{\alpha_1 < \cdots < \alpha_l} \prod_{i \in \mu} (S_i^{\alpha_1} \cdots S_i^{\alpha_l}) \quad (\text{A.28})$$

とできる.

ここで $\mathcal{D}_\mu = 0, 1, 2, \dots$ とし, A.1.1 節と同様の変形をすると,

$$[Z^n]_{J,D} = \frac{1}{N_D} \text{Tr} \oint d_C z \exp \left\{ \cosh^n \beta \sum_{l=0}^n [\tanh^l \beta J_\mu] \sum_{\alpha_1 < \dots < \alpha_l} \sum_{\mu} z_{\mu(1)} \cdots z_{\mu(K)} \prod_{i \in \mu} (S_i^{\alpha_1} \cdots S_i^{\alpha_l}) \right\} \quad (\text{A.29})$$

とできる. さらに

$$\sum_{\mu} z_{\mu(1)} \cdots z_{\mu(K)} \prod_{i \in \mu} (S_i^{\alpha_1} \cdots S_i^{\alpha_l}) \approx \frac{1}{K!} \left(\sum_{i=1}^N z_i S_i^{\alpha_1} \cdots S_i^{\alpha_l} \right)^K \quad (\text{A.30})$$

となるので, 実空間方向に一体化された.

A.1.3 RS 仮定

A.1.1 節と同様に, Dirac δ とその積分表示によって秩序変数を導入する. ただしその際, レプリカ対称性を仮定することで相互作用にいくつかのレプリカが参加しているか, という数だけで index できるので,

$$q_l = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N z_i S_i^{\alpha_1} \cdots S_i^{\alpha_l} \quad (\text{A.31})$$

およびその Dirac δ の積分表示の積分変数を \hat{q}_l と書く. これら秩序変数を用いると, $[Z^n]_{J,D}$ は

$$\begin{aligned} [Z^n]_{J,D} = & \frac{1}{N_D} \text{Tr} \oint d_C z \int \prod_l \frac{dq_l d\hat{q}_l}{2\pi i} \exp \left\{ \cosh^n \beta \sum_l [\tanh^l \beta J_\mu] {}_n C_l \frac{(Nq_l)^K}{K!} \right. \\ & \left. + \sum_l \sum_{\alpha_1 < \dots < \alpha_l} \hat{q}_l \left(\sum_{i=1}^N z_i S_i^{\alpha_1} \cdots S_i^{\alpha_l} - Nq_l \right) \right\} \end{aligned} \quad (\text{A.32})$$

となる. さらに, 母関数表示

$$q_l = q \int dx \pi(x) \tanh^l(\beta x) \quad (\text{A.33})$$

$$\hat{q}_l = \hat{q} \int d\hat{x} \hat{\pi}(\hat{x}) \tanh^l(\beta \hat{x}) \quad (\text{A.34})$$

$$\text{with } \int \pi(x) dx = \int \hat{\pi}(\hat{x}) d\hat{x} = 1 \quad (\text{A.35})$$

を用いると,

$$(\text{exponents 第 1 項}) \quad (\text{A.36})$$

$$= \frac{(Nq)^K}{K!} \cosh^n \beta \sum_l {}_n C_l [\tanh^l \beta J_\mu] q_l^K \quad (\text{A.37})$$

$$= \frac{(Nq)^K}{K!} \cosh^n \beta \sum_l \int \left\{ \prod_{k=1}^K dx_k \pi(x_k) \right\} {}_n C_l [\tanh^l \beta J_\mu] \prod_{k=1}^K \tanh^l(\beta x_k) \quad (\text{A.38})$$

$$= \frac{(Nq)^K}{K!} \cosh^n \beta \int \left\{ \prod_{k=1}^K dx_k \pi(x_k) \right\} \left[\left(1 + \tanh(\beta J_\mu) \prod_{k=1}^K \tanh(\beta x_k) \right)^n \right] \quad (\text{A.39})$$

$$=: \frac{(Nq)^K}{K!} \cosh^n \beta I_1 \quad (\text{A.40})$$

$$(\text{exponents 第2項}) = \sum_l \sum_{\alpha_1 < \dots < \alpha_l} \hat{q}_l \sum_{i=1}^N z_i S_i^{\alpha_1} \dots S_i^{\alpha_l} \quad (\text{A.41})$$

$$= \sum_i \hat{q}_i z_i \int d\hat{x} \hat{\pi}(\hat{x}) \prod_{\alpha=1}^n (1 + S_i^\alpha \tanh(\beta \hat{x})) \quad (\text{A.42})$$

$$(\text{exponents 第3項}) = \sum_l \sum_{\alpha_1 < \dots < \alpha_l} N \hat{q}_l q_l \quad (\text{A.43})$$

$$= N q \hat{q} \int dx d\hat{x} \pi(x) \hat{\pi}(\hat{x}) (1 + \tanh(\beta x) \tanh(\beta \hat{x}))^n \quad (\text{A.44})$$

$$=: N q \hat{q} I_2 \quad (\text{A.45})$$

とできる. よって z_i たちの積分を

$$\oint \frac{dz}{2\pi i z^{C+1}} e^{\alpha z} = \frac{\alpha^C}{C!} \quad (\text{A.46})$$

によって取ると,

$$[Z^n]_{J,D} = \int \prod_l \frac{dq_l d\hat{q}_l}{2\pi i} \frac{1}{\mathcal{N}_D} \text{Tr} \exp \left\{ \frac{(Nq)^K}{K!} \cosh^n \beta I_1 - N q \hat{q} I_2 \right\} \times \quad (\text{A.47})$$

$$\frac{1}{C!^N} \left\{ \int \hat{\pi}(\hat{x}) d\hat{x} \prod_{\alpha} (1 + S^\alpha \tanh(\beta \hat{x})) \right\}^{CN} \quad (\text{A.48})$$

$$= \int \prod_l \frac{dq_l d\hat{q}_l}{2\pi i} \frac{1}{\mathcal{N}_D} \exp \left\{ \frac{(Nq)^K}{K!} \cosh^n \beta I_1 - N q \hat{q} I_2 + N \log \left(\frac{\hat{q}^C}{C!} \right) + \log I_3 \right\} \quad (\text{A.49})$$

となる. ここに

$$I_3 = \int \left\{ \prod_{\gamma=1}^C \hat{\pi}(\hat{x}) d\hat{x}_\gamma \right\} \left\{ \prod_{\gamma=1}^C (1 + \tanh(\beta \hat{x}_\gamma)) + \prod_{\gamma=1}^C (1 - \tanh(\beta \hat{x}_\gamma)) \right\}^n \quad (\text{A.50})$$

である. この段階で trace を取ることができた.

ここで熱力学極限を取ると, q_l, \hat{q}_l による積分は, その極値で近似できる. しかし今, q_l たちをモーメントに持つ分布 π で書いたので, この分布に関する極値操作とする³⁵. このことによって n についての接続がなされ,

$$\phi(n) = - \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{\beta n} \text{extr}_{q, \hat{q}, \pi, \hat{\pi}} \left\{ \frac{(Nq)^K}{K!} \cosh^n \beta I_1 - N q \hat{q} I_2 + N \log \left(\frac{\hat{q}^C}{C!} \right) + N \log I_3 - \log \mathcal{N}_D \right\} \quad (\text{A.51})$$

となる. この式で, q, \hat{q} についての極値操作を先にとると, 大部分が \mathcal{N}_D と打ち消して, 上式は

$$\phi(n) = - \frac{C}{K\beta} \log \cosh \beta - \frac{1}{\beta n} \text{extr}_{\pi, \hat{\pi}} \left\{ \frac{C}{K} \log I_1 - C \log I_2 + \log I_3 \right\} \quad (\text{A.52})$$

と, 大幅に簡略化される.

³⁵ 自由度は冗長化しているように見えるが, n が整数であれば $I_i (i=1, 2, 3)$ に寄与するのは $\pi, \hat{\pi}$ の n 次のモーメントまでであることが確認できるので, 実質的な自由度は n が整数であれば変わっていない. しかし後で示すように, $n < 1$ では π の高次のモーメントとしての性質が自由エネルギーに寄与するのがわかる. これは n を実数に接続をするということが, π の full distribution に関する情報を要求することを意味しているが, そのより深い理解はない(と思う).

鞍点方程式は $\pi, \hat{\pi}$ によって汎関数微分し整理することで,

$$\pi(x) = \frac{I_2}{I_3} \int \prod_{\gamma=1}^{C-1} d\hat{x}_\gamma \hat{\pi}(\hat{x}_\gamma) (A_+ + A_-)^n \delta \left(x - \sum_{\gamma=1}^{C-1} \hat{x}_\gamma \right) \quad (\text{A.53})$$

$$\hat{\pi}(\hat{x}) = \frac{I_2}{I_1} \int \prod_{k=1}^{K-1} dx_k \pi(x_k) \frac{1}{2} \sum_{J_\mu=\pm 1} \delta \left(\hat{x} - \frac{1}{\beta} \text{atanh} \left(\tanh(\beta J_\mu) \prod_{k=1}^{K-1} \tanh(\beta x_k) \right) \right) \quad (\text{A.54})$$

と求めることができる. ここに

$$A_{\pm} = \prod_{\gamma=1}^{C-1} (1 \pm \tanh(\beta \hat{x}_\gamma)) \quad (\text{A.55})$$

である.

A.2 鞍点評価の方法

前節で評価した RS 解を, 数値的に評価する手法をまとめる³⁶.

RS 解の秩序変数は $\pi(x), \hat{\pi}(\hat{x})$ という関数であるため, 鞍点方程式は関数方程式になっていた. ここでは (A.53), (A.54) 式を再帰的に解く. この手法は一言で言って, π や $\hat{\pi}$ を, そこからのサンプリングと同一視するものである. そのアルゴリズムは以下のようなものである:

1. $\pi(x)$ のヒストグラムの初期値を生成する. 具体的には, 配列 $\{h_i\}$ ($i = 1, \dots, M$) を用意し, そこに区間 $[-C+1, C-1]$ の一様乱数を入れていく.
2. π から $K-1$ 個のサンプリングをして, $\frac{1}{\beta} \text{atanh} \left(\tanh \beta \prod_{k=1}^{K-1} \tanh(\beta x_k) \right) =: \hat{x}$ を計算する. サンプリングは, 1 から M まで一様に分布する整数の乱数 I を用いて, $x_k = h_I$ とする.
3. \hat{x} の符号を確率 $1/2$ で定める.
4. 2, 3 を $\hat{\pi}$ のサンプルを得るのに十分な回数繰り返す. そのサンプルを \hat{h}_i とおく.
5. $\hat{\pi}$ から $C-1$ 個のサンプリングをして, $\sum_{\gamma=1}^{C-1} \hat{x}_\gamma =: x$ を計算する.
6. x を確率 $(A_+ + A_-)^n / 2^{(C-1)n} (< 1)$ で棄却しながら, π からの十分な数のサンプルを作る.
7. 2 に戻る.

A.3 数値計算の詳細

本研究における MC 計算は, 交換 MC 法を用いた. これは, 通常の Metropolis 更新に加え, 温度の異なるレプリカ間の交換も詳細釣り合いを満たすように行うものである. 以下では, $p(\mathbf{S}|\beta)$ を逆温度 β の Boltzmann 分布とし, 交換 MC 法の拡張アンサンブルを

$$P(\{\mathbf{S}^i\}_{i=1}^M | \{\beta_i\}_{i=1}^M) = \prod_{i=1}^M p(\mathbf{S}^i | \beta_i) \quad (\text{A.56})$$

と書く. 本研究では, エネルギーの測定において $K = 2, 3$ のとき共に $M = 30$ をとった.

具体的には以下の手続きによって行った. この手続き一回分を, 以下では 1 MC step(MCS) と呼ぶ.

³⁶ 樺島先生の御教授による.

N	N_s	N_r
32	1×10^5	4096
48	1×10^5	2048
64	1×10^5	1024
128	1×10^6	512
256	1×10^7	128
512	5×10^8	30

表 3: $K = 2$ のときの MCS とサンプル数の表.

N	N_s	N_r
30	1×10^5	4096
36	1×10^5	4096
45	2×10^5	2048
60	4×10^5	1024
75	8×10^5	1024
120	3×10^6	512
240	1×10^8	128

表 4: $K = 3$ のときの MCS とサンプル数の表.

1. 各 $i = 1, 2, \dots, M$ について $p(\mathbf{S}^i | \beta_i)$ を定常分布とする Metropolis 法による, スピン \mathbf{S}^i すべての更新を行う.
2. $i = 1, 3, 5 \dots$ または $i = 2, 4, 6 \dots$ に対し, $\mathbf{S}^i \leftrightarrow \mathbf{S}^{i+1}$ のスピンを交換確率 $\frac{p(\mathbf{S}^i | \beta_{i+1})p(\mathbf{S}^{i+1} | \beta_i)}{p(\mathbf{S}^i | \beta_i)p(\mathbf{S}^{i+1} | \beta_{i+1})}$ で交換する. i は偶数 MCS の時は偶数, そうでないとき奇数をとることにする.

実際のシミュレーションでは, この MCS を $2N_s$ 回行った. うち N_s MCS は初期緩和のため捨て, 残り N_s MCS を測定に当てた. エネルギーの測定の際に用いた, 各パラメータごとの N_s およびランダム平均をとった母数 N_r の値は, 表 3, 4 にある.

このようにして得られた MC 列から連続な温度の関数としてのエネルギー $E(T)$ を得るために, 本研究ではリウエイティング法を行った [31]. リウエイティング法とは, 以下の公式

$$\langle E \rangle^{(\beta)} = \langle E \exp((\beta_0 - \beta)E) \rangle^{(\beta_0)} \quad (\text{A.57})$$

に従って, 左辺を評価するものである. ここに $\langle \dots \rangle^{(\beta)}$ は逆温度 β におけるシミュレーションにわたる平均を意味する. この公式において, β_0 として実際にシミュレーションした温度にとり, β として必要な温度をとることで, 左辺が評価される. 実際には, β に対して $|\beta - \beta_0|$ が最小になるように β_0 を選んだ.

そして, このようにして評価した $E(T)$ を熱力学積分することによって, 自由エネルギー F とエントロピー S を評価した.

$$F = T \int_{T'}^{\infty} \frac{dT'}{T'^2} E(T') \quad (\text{A.58})$$

$$S = \frac{E - F}{T} \quad (\text{A.59})$$

交換法の最低温度は $K = 2, 3$ とともに $T = 0.5$ とした. しかし, 図 19 にあるように, $K = 3, T = 0.5$ におけるエネルギーの分布はほぼ δ 関数であった. そこで $K = 3$ のときは, $T \geq 0.2$ までのエネルギーは, $T = 0.5$ でのヒストグラムにリウエイティングをかけることで得た.

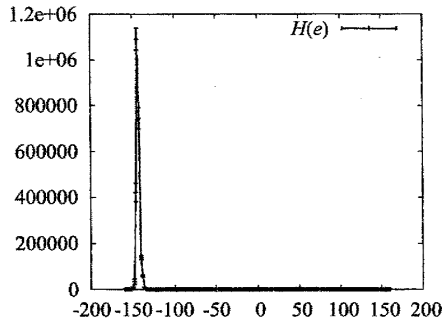
また重なり変数の評価は, Young による実レプリカの手法 [16] を用いた:

$$\langle q \rangle = \frac{1}{Z^2} \text{Tr}_{12} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N S_i^1 S_i^2 \exp(-\beta(H^1 + H^2)) \quad (\text{A.60})$$

重なり変数の MC 計算において要した N_s および N_r の値は, 表 5, 6 にある.

謝辞

まず第一に, 私の指導教員である福島孝治先生に感謝したいと思います. 日頃から多くの時間を議論に割いて下さり, 研究を進めていく上で行き詰まった点についてわかりやすくご指導下さいました. 私のよ


 図 19: $K = 3, T = 0.5, N = 120$ でのエネルギーのヒストグラムのランダム平均.

N	N_s	N_r
32	5×10^5	4000
64	2×10^6	1000
128	3×10^7	500
256	1×10^8	400

 表 5: $K = 2$ のときの MCS とサンプル数の表.

N	N_s	N_r
30	5×10^6	4000
60	2×10^6	1000
120	5×10^7	500
180	1×10^8	300
240	1×10^8	300

 表 6: $K = 3$ のときの MCS とサンプル数の表.

うな院生の面倒を、辛抱強く見て下さったことに心から感謝いたします。また、研究対象と向き合う際の態度に、福島先生から多大な影響を受けました。日々の指導を通じてであったり日常の会話を通じて伺ったりしたお言葉は、知らず知らずの内に、自分の研究態度に強く反映されております。修士・博士という、今後の研究者生活における基礎となるべき時期を、ここ福島研究室で過ごすことができるのを有り難く、また誇りに思います。

セミナーや日頃の議論などで様々な指摘を下さいました佐々真一先生にも感謝いたします。物理の考え方の基本を学部生の頃から教えていただきましたおかげで、それらが現在の私の考えの背景になっております。また樺島祥介先生には、具体的な研究に関する助言やアルゴリズムのご指導を頂きました。付録 A.2 の内容や 5 章での摂動 Hamiltonian の導出など、実に多くのことを教えていただきました。三村和史先生には、セミナーにおいて疎結合スピングラス模型のレプリカ解析を詳細にわたってご教授いただきました。第 6 章は、三村先生のセミナーに強く触発されました。

また、輪講のセミナーと一緒に勉強させていただいた中島千尋さん、観山正道さん、井上雅世さん、坂田綾香さん、平間毅さんには、多くのことを教えていただきました。また、中島千尋さん、坂田綾香さん、平間毅さん、中田豊さんら福島研究室の諸先輩方には、研究を進めて行く上で様々なご指導を頂きました。岩田真実さん、観山正道さん、太田洋輝さんら佐々研究室の諸先輩方には、私の気付かなかったような観点から、様々なことをご指摘いただきました。桜井靖久さん、根本隼さん、豊田久子さんら 211 号室の皆様には、日常生活の中で色々とお世話になりました。皆様のおかげで研究活動を行うことができました。本当に心から感謝いたします。

最後に、私の父博、母あけみ、妹陽子ら私の家族に感謝いたします。私が毎日元気に研究を行うことができたのは、家族の温かい支援があったからです。本当にありがとうございました。

参考文献

- [1] V. Cannella and J. A. Mydosh. Phys. Rev. B **6**, 4220(1972).
- [2] S. F. Edwards and P. W. Anderson. J. Phys. F **5**, 965(1975).

- [3] P. Weiss. *J. Phys.* **6**, 667(1907).
- [4] D. J. Thouless, P. W. Anderson, and R. G. Palmer. *Phyl. Mag.* **35**, 593(1977).
- [5] J. S. Yedidia, W. T. Freeman, and Y. Weiss. *IEEE Trans on Inf. Theory* **51**, 2283(2005).
- [6] S. Katsura, S. Inawashiro, and S. Fujiki. *Physica* **99A**, 193(1979).
- [7] A. J. Bray and M. A. Moore. *J. Phys. C* **13**, L469(1980).
- [8] G. Parisi. *J. Phys. A* **13**, L115(1980).
- [9] M. Talagrand. *Ann. Math.* **163**, 221(2006).
- [10] D. Sherrington and S. Kirkpatrick. *Phys. Rev. Lett.* **35**, 1792(1975).
- [11] E. Gardner. *Nucl. Phys. B* **257**, 747(1985).
- [12] 西森秀稔. スピングラス理論と情報統計力学. 岩波書店 (1999).
- [13] J. R. L. de Almeida and D. J. Thouless. *J. Phys. A* **11**, 983(1978).
- [14] K. Nemoto and H. Takayama. *J. Phys. C* **18**, L529(1985).
- [15] C. De Dominicis and A. P. Young. *J. Phys. A* **16**, 2063(1983).
- [16] A. P. Young. *Phys. Rev. Lett.* **51**, 1206(1983).
- [17] J. L. van Hemmen and R. G. Palmer. *J. Phys. A* **12**, 563(1979).
- [18] R. B. Griffiths. *J. Math. Phys.* **5**, 1215(1964).
- [19] A. Crisanti, G. Paladin, H. J. Sommers, and A. Vulpiani. *J. Phys. I* **2**, 1325(1992).
- [20] G. Parisi and T. Rizzo. *Phys. Rev. Lett.* **101**, 117205(2008).
- [21] I. Kondor. *J. Phys. A* **16**, L127(1983).
- [22] D. J. Gross, I. Kanter, and H. Sompolinsky. *Phys. Rev. Lett.* **55**, 304(1985).
- [23] F. Guerra. *Int. J. Mod. Phys. B* **10**, 1675(1997).
- [24] S. Franz, M. Mézard, G. Parisi, and L. Peliti. *J. Stat. Phys.* **97**, 459(1999).
- [25] F. Guerra. *Commun. Math. Phys.* **233**, 1(2003).
- [26] K. Hukushima and K. Nemoto. *J. Phys. Soc. Jpn.* **65**, 1604(1996).
- [27] Y. Iba. *Int. J. Mod. Phys. C* **12**, 623(2001).
- [28] S. Boettcher. *Euro. Phys. J. B* **31**, 29(2003).
- [29] K. Hukushima and H. Kawamura. *Phys. Rev. E* **62**, 3360(2000).
- [30] B. D. McKay and N. C. Wormald. *Journal of Algorithms* **11**, 52(1990).
- [31] A. M. Ferrenberg and R. H. Swendsen. *Phys. Rev. Lett.* **63**, 1195(1989).